



# Difraction et diffusion de la lumiere : modelisation tridimensionnelle et application a la metrologie de la microelectronique et aux techniques d'imagerie selective en milieu diffusant

Laurent Arnaud

## ► To cite this version:

Laurent Arnaud. Difraction et diffusion de la lumiere : modelisation tridimensionnelle et application a la metrologie de la microelectronique et aux techniques d'imagerie selective en milieu diffusant. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 2008. Français. NNT: . tel-00385414

**HAL Id: tel-00385414**

**<https://theses.hal.science/tel-00385414>**

Submitted on 19 May 2009

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse présentée à l'université Paul Cézanne, Aix-Marseille III pour obtenir le grade  
de docteur en science : N° 2008AIX30067  
Ecole doctorale : Physique et sciences de la matière  
Spécialité : Optique, électromagnétisme et image

**Diffraction et diffusion de la lumière : modélisation  
tridimensionnelle et application à la métrologie de  
la microélectronique et aux techniques d'imagerie  
sélective en milieu diffusant**

Laurent ARNAUD

17 juillet 2008

Institut Fresnel, équipe MAP2 - Marseille  
STMicroelectronics - Rousset

**Membres du jury :**

Pierre CHAVEL	Rapporteur
Marc SAILLARD	Rapporteur
Antonello DE MARTINO	Examineur
Philippe MAILLOT	Examineur
Claude AMRA	Directeur de thèse
Carole DEUMIÉ	Codirectrice de thèse



# Remerciements

Ce travail de recherche a été réalisé au sein de l'équipe Milieu Aléatoires et Photonique de Puissance (MAP2) de l'Institut Fresnel ainsi qu'au sein de l'équipe de métrologie en ligne du centre de fabrication de STMicroelectronics à Rousset et a été financé dans le cadre d'un contrat CIFRE.

Je tiens à remercier Mireille COMMANDRÉ, professeur à l'Ecole Centrale Marseille, pour m'avoir accueilli dans son équipe de recherche, et Philippe MAILLOT, directeur de l'équipe métrologie en ligne de STMicroelectronics Rousset, pour son accueil au sein de STMicroelectronics. Je remercie également ces deux personnes pour leur rôles dans la coordination et la définition du projet de collaboration entre STMicroelectronics et l'institut Fresnel, qu'à constitué ma thèse.

Je remercie chaleureusement, Claude AMRA, directeur de recherches au CNRS et directeur de l'Institut Fresnel durant l'essentiel de ma thèse, ainsi que Carole DEUMIÉ, professeur à l'Ecole Centrale Marseille, pour m'avoir confié un sujet particulièrement attrayant et m'avoir dirigé durant ces années. J'ai grandement apprécié d'être au contact de ces personnes d'une intelligence et d'une efficacité rares, et d'une grande richesse humaine.

Je remercie également Pierre CHAVEL et Marc SAILLARD de m'avoir fait l'honneur de rapporter, de juger et de mettre en perspective mon travail de thèse, ainsi qu'Antonello DE MARTINO, pour avoir non seulement participer à juger mon travail, mais également pour m'avoir fourni de précieux échantillons durant ma thèse.

Ma gratitude va également vers Olivier GILBERT, Franck BILLARD, Patrick FERRAND et Gaëlle GEORGES, que j'ai côtoyé quotidiennement et qui, grâce aux nombreux échanges scientifiques que j'ai eu avec eux, ont notablement contribué aux idées présentes dans cette thèse.

Je remercie également les différents grands spécialistes de l'Institut Fresnel qui m'ont apporté leur aide à de nombreuses reprises et m'ont aidé à y voir plus clair dans le domaine de la modélisation électromagnétique : Evgueni POPOV, Hugues GIOVANNINI, Anne SENTENAC, Hassan AKHOUAYRI et Nicolas BONOD, en particulier.

Je remercie l'ensemble des personnes de l'équipe métrologie de ST, en particulier Emilienne ROISIN qui a grandement contribué à l'orientation de mon

travail et à l'accroissement de mes connaissances dans le domaine de la métrologie optique et des techniques de fabrication de la microélectronique, ainsi que Ghislaine CASTEL pour le temps qu'elle a consacré à partager son savoir faire.

Je remercie également Gérard LOUIS, directeur du Laboratoire de Neuro-Physique Cellulaire, de m'avoir accueilli en tant qu'ATER dans son laboratoire durant ma dernière année de thèse et de m'avoir confié des enseignements particulièrement intéressants. Merci aussi à Benoît FORGET, professeur à l'Université Paris Descartes, pour la qualité de son encadrement et de ses projets de recherche, que je n'ai eu hélas que le temps d'aborder.

Merci enfin à toutes les personnes que j'ai croisé quotidiennement à l'Institut Fresnel, en particulier Myriam ZERRAD, Laure SIOZADE et un grand nombre de collègues thésards, avec qui j'ai partagé des moments divers, variés et enrichissants.

*A mes parents*



# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>i</b>
<b>Table des matières</b>	<b>v</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>I Outils pour le calcul de la diffraction et de la diffusion</b>	<b>7</b>
<b>1 Méthode différentielle classique</b>	<b>9</b>
1 Les équations de Maxwell . . . . .	9
1.1 Equations de Maxwell en régime transitoire . . . . .	10
1.2 Equations de Maxwell en régime harmonique . . . . .	10
1.3 Equations de Maxwell en régime harmonique pour des milieux linéaires, isotropes, non magnétiques, en l'absence de charge et de courant électriques . . . . .	10
2 Définition du problème . . . . .	11
2.1 Structure et conditions d'éclairement . . . . .	11
2.2 Découplage en TE et TM . . . . .	12
2.3 Forme générale des champs en dehors de la zone modulée	13
3 Méthode différentielle classique en polarisation TE . . . . .	15
3.1 Equations du champ à l'intérieur de la zone modulée . .	15
3.2 Champ en dehors de la zone modulée . . . . .	18
3.3 Existence d'une relation linéaire entre les solutions aux extrémités de la zone modulée . . . . .	20
3.4 Résolution des équations par méthode de tir . . . . .	20
4 Méthode différentielle classique en polarisation TM . . . . .	21
4.1 Equations du champ . . . . .	21
4.2 Champ en dehors de la zone modulée . . . . .	23
4.3 Méthode de tir cas TM . . . . .	24
5 Distinction entre structures périodiques et non périodiques . . .	24
5.1 Obtention du cas périodique à partir du cas général . . .	25



5.2	Périodisation d'une structure non périodique par discrétisation dans l'espace de Fourier . . . . .	26
6	Expression de l'intensité diffractée . . . . .	27
6.1	Cas général, structures non périodiques . . . . .	27
6.2	Cas des structures périodiques . . . . .	28
6.3	Cas d'une pseudo périodicité . . . . .	29
<b>2</b>	<b>Formulation stable et efficace des algorithmes et validation</b>	<b>31</b>
1	Algorithme des matrices $S$ . . . . .	32
1.1	Illustration de l'instabilité numérique . . . . .	32
1.2	Matrices $T$ . . . . .	32
1.3	Matrices $S$ . . . . .	35
1.4	Stabilité numérique de l'algorithme des matrices $S$ . . . . .	36
2	Factorisation des séries de Fourier . . . . .	37
2.1	Règles de factorisation de L. Li . . . . .	39
2.2	Réécriture des équations en polarisation TM . . . . .	40
2.3	Cas particulier d'une structure invariante selon $(Oz)$ (méthode RCWA) . . . . .	44
3	Algorithme d'intégration matriciel . . . . .	46
3.1	Principe de l'algorithme Runge et Kutta d'ordre 4 classique	46
3.2	Algorithme d'intégration matriciel basé sur Runge et Kutta	47
3.3	Optimisation de l'algorithme . . . . .	48
4	Validation . . . . .	49
4.1	Conservation de l'énergie . . . . .	49
4.2	Théorème de réciprocité . . . . .	49
4.3	Comparaison avec d'autres méthodes numériques . . . . .	50
4.4	Influence des paramètres numériques . . . . .	51
4.5	Cas de la méthode RCWA appliquée à des profils arbitraires . . . . .	58
<b>3</b>	<b>Méthode différentielle conique</b>	<b>67</b>
1	Définition du problème . . . . .	68
1.1	Dépendance en $y$ du champ . . . . .	69
1.2	Expression du champ incident . . . . .	69
2	Equations différentielles du champ . . . . .	70
2.1	Ecriture de la relation de dispersion . . . . .	70
2.2	Ecriture des équations des champs sous forme intégrable	72
2.3	Résolution des équations . . . . .	75
2.4	Cas particulier d'une structure invariante selon $(Oz)$ . . .	76
3	Expression de l'intensité diffractée . . . . .	77
4	Validation . . . . .	78
<b>4</b>	<b>Méthode différentielle tridimensionnelle</b>	<b>81</b>

1	Définition du problème . . . . .	83
1.1	Structure et conditions d'éclairement . . . . .	83
1.2	Espace de Fourier à 2 dimensions : définitions et notations . . . . .	84
2	Equations du champ dans le cas d'une structure de forme quelconque . . . . .	87
2.1	Relation de dispersion . . . . .	87
2.2	Détermination du vecteur $N$ . . . . .	88
2.3	Expression du système d'équations différentielles . . . . .	90
3	Equations du champ dans le cas d'une structure invariante selon $(Oz)$ . . . . .	93
4	Résolution des équations et expression de l'intensité . . . . .	94
5	Tests et validation . . . . .	94
5.1	Durée du calcul . . . . .	94
5.2	Structures diélectriques . . . . .	96
5.3	Structures métalliques . . . . .	98
5.4	Structures invariantes selon $(Oz)$ . . . . .	99

## II Applications

105

<b>1</b>	<b>Diffusions surfacique et volumique</b>	<b>107</b>
1	Mesure ellipsométrique du champ diffracté ou diffusé . . . . .	108
1.1	Description du banc de mesure . . . . .	108
1.2	Mesure ellipsométrique du champ . . . . .	109
2	Description des structures diffusantes . . . . .	112
2.1	Surfaces rugueuses . . . . .	112
2.2	Volumes hétérogènes . . . . .	113
3	Intensité de la lumière diffusée . . . . .	114
3.1	Diffusion par une surface rugueuse . . . . .	114
3.2	Diffusion par un volume hétérogène . . . . .	118
4	Déphasage polarimétrique de la lumière diffusée . . . . .	118
4.1	Diffusion par une surface rugueuse . . . . .	118
4.2	Diffusion par un volume hétérogène . . . . .	120
4.3	Cas intermédiaires entre diffusion surfacique et volumique . . . . .	123
5	Bilan . . . . .	128
<b>2</b>	<b>Annulation ellipsométrique de la diffusion : cas des fortes rugosités</b>	<b>129</b>
1	Principe de la technique d'annulation ellipsométrique de la diffusion . . . . .	129
2	Détermination théorique des paramètres d'annulation . . . . .	131
2.1	Cas des grandes longueurs de corrélation : modèle des réflexions locales . . . . .	131

2.2	Cas des faibles rugosités et faibles hétérogénéités : théorie du premier ordre . . . . .	133
2.3	Cas général : méthode différentielle . . . . .	134
3	Cas des surfaces de forte pente et des volumes de forte hétérogénéité . . . . .	134
4	Cas des surfaces de pentes modérées . . . . .	137
4.1	Différence entre une surface de faible pente et une surface de forte pente pour une même rugosité . . . . .	137
4.2	Influence de la rugosité pour une pente modérée . . . . .	140
4.3	Exemple d'annulation . . . . .	144
<b>3</b>	<b>Application à la métrologie en microélectronique</b>	<b>147</b>
1	Contexte : l'industrie de la microélectronique . . . . .	147
1.1	Un secteur en constante évolution . . . . .	147
1.2	Principe de fabrication des composants microélectroniques	149
1.3	Métrologie des composants microélectroniques . . . . .	150
2	Reconstruction du profil à partir de mesures ellipsométriques .	152
2.1	Résolution du problème inverse de diffraction . . . . .	152
2.2	Reconstruction à partir de mesures en fonction de l'angle d'incidence . . . . .	155
2.3	Reconstruction à partir de mesures en fonction de la longueur d'onde . . . . .	158
3	Cas des structures complexes . . . . .	160
3.1	Structures non lamellaires . . . . .	160
3.2	Structures tridimensionnelles : métrologie des trous de contacts . . . . .	162
4	Bilan . . . . .	163
<b>4</b>	<b>Diffusion de la lumière par des réseaux rugueux</b>	<b>165</b>
1	Rugosité des lignes en microélectronique . . . . .	165
2	Calcul et mesure de la diffusion par un réseau rugueux . . . . .	167
2.1	Calcul de la diffraction et de la diffusion par un réseau rugueux . . . . .	167
2.2	Mesure de la lumière diffusée par un réseau rugueux . .	169
3	Modélisation adaptée . . . . .	171
4	Bilan et perspectives . . . . .	173
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>175</b>
	<b>Annexes</b>	<b>179</b>
<b>A</b>	<b>Relations de récursion pour l'algorithme des matrices S</b>	<b>181</b>

---

<b>B</b>	<b>Comparaison entre la méthode différentielle et la méthode des sources fictives pour un réseau diélectrique en transmission</b>	<b>185</b>
<b>C</b>	<b>Relations entre les composantes des champs selon (<math>Ox</math>) et celles selon (<math>Oy</math>)</b>	<b>187</b>
<b>D</b>	<b>Passage des vecteurs <math>F</math> aux vecteurs <math>V</math> et réciproquement</b>	<b>189</b>
1	Passage du vecteur $[V]$ au vecteur $[F]$ équivalent . . . . .	190
2	Passage du vecteur $[F]$ au vecteur $[V]$ équivalent . . . . .	190
	<b>Bibliographie</b>	<b>193</b>



# Introduction

La lumière est un des principaux messagers utilisés par l'homme pour recueillir de l'information sur son environnement. Après avoir interagi avec un objet, la lumière porte en effet une empreinte de cette interaction qu'il est possible de décoder pour en déduire certaines propriétés de l'objet.

La lecture de cette information peut se faire de la façon la plus classique grâce à l'oeil qui nous permet de caractériser l'intensité, la direction ou la distribution spectrale moyenne de la lumière.

L'information convoyée par la lumière est cependant encore beaucoup plus riche que ce qu'est capable de décoder l'oeil : la polarisation, la phase, le spectre, sont des grandeurs qui ne sont pas mesurées par l'oeil où seulement en partie et qui sont également riches d'informations. De plus le traitement que nous faisons de ces informations est souvent limité aux échelles (au niveau de l'objet) supérieures ou de l'ordre de la longueur d'onde. La lumière porte cependant également des informations caractéristiques des dimensions inférieures, mais pour pouvoir les décoder, il faut d'une part maîtriser précisément les conditions de la mesure et d'autre part recourir à une modélisation électromagnétique rigoureuse de l'interaction.

Dans le cas où la structure est relativement simple ou ordonnée et que l'on s'intéresse au lien déterministe qui existe entre elle et la lumière résultante, on appelle généralement l'interaction la *diffraction* de la lumière.

Dans le cas où la structure est complexe ou désordonnée d'un certain point de vue et que l'on s'intéresse plus à une caractérisation statistique que déterministe, l'interaction est appelée *diffusion* de la lumière.

Un des domaines où le besoin en techniques de caractérisation précises à l'échelle submicrométrique est très fort est celui de l'industrie de la micro-électronique. La dimension des structures gravées diminue à chaque nouvelle génération de composants et les structures actuelles, qui ont des dimensions latérales inférieures à 100 nm, doivent être mesurées avec une répétabilité de l'ordre du nanomètre. La microscopie électronique à balayage qui était jusqu'à présent l'outil principalement utilisé pour la mesure de ces dimensions latérales, est aujourd'hui progressivement remplacée par des techniques optiques qui répondent mieux aux contraintes de précision et de répétabilité, tout en

étant plus rapides, totalement non-destructives et moins coûteuses.

Ce travail de doctorat a été réalisé dans le cadre d'un contrat CIFRE avec la société STMicroelectronics, avec pour objectif d'aller plus avant dans le développement de ces outils pour la caractérisation en ligne des composants. Dans ce domaine en pleine progression, une des clés réside dans l'implémentation de codes électromagnétiques performants et suffisamment rapides, et d'algorithmes de reconstruction.

A cette échelle, seule une modélisation électromagnétique exacte permet de rendre compte de l'interaction entre la lumière et la structure. La structure diffractante est généralement constituée de plusieurs matériaux imbriqués et toutes les méthodes électromagnétiques ne permettent pas de résoudre ce problème. La méthode généralement utilisée par les équipementiers est la méthode RCWA<sup>1</sup> qui permet de résoudre les équations en présence de plusieurs matériaux. Cette méthode initialement prévue pour des structures lamellaires (c'est à dire de forme rectangulaire) est souvent utilisée également pour des structures de forme arbitraire mais il a été montré [2] qu'elle convergait lentement dans cette situation en raison d'une factorisation inadaptée des séries de Fourier [3].

La méthode qui possède des règles de factorisation adaptée [4] dans le cas de structures de forme arbitraires est la *méthode différentielle* et c'est elle que nous avons mis en oeuvre.

La plupart des structures mesurées par scatterometrie sont des structures périodiques invariantes selon une dimension, c'est à dire des réseaux classiques, dont la période est généralement inférieure ou de l'ordre de la longueur d'onde. Cependant certains éléments du circuit ne peuvent être représentés correctement par une structure de test invariante selon une dimension. C'est le cas des trous de contact qui sont approximativement de forme cylindrique et qui sont mesurés sur des structures de test bipériodiques. Dans ce cas, la modélisation électromagnétique doit donc être adaptée aux structures bipériodiques. De la même façon que pour le cas des structures invariantes selon une dimension, les algorithmes habituellement utilisés sont généralement restreints à des structures lamellaires et dont les parois sont parallèles aux directions de périodicité [5]. Dans le cas où cette modélisation est appliquée à des structures de forme cylindrique, on observe également une mauvaise convergence des résultats. Les équations respectant les règles de factorisation correctes dans le cas de ces structures tridimensionnelles de forme arbitraires, ont été établies [6], mais leur application s'est heurtée jusqu'à présent à une lourdeur numérique liée à la complexité de la modélisation. Nous verrons que ce problème peut être surmonté grâce à une nouvelle façon d'intégrer les équations qui réduit le nombre d'opérations de plusieurs ordre de grandeurs.

---

<sup>1</sup>Rigorous Coupled Waves Analysis [1], également appelée, MMFE : Modal Method by Fourier Expansion.

Les structures qui constituent la structure de test ne sont cependant pas parfaitement périodiques. Chaque ligne présente en effet une rugosité de ligne (LER : Line Edge Roughness), qui se traduit aussi par une rugosité de la largeur de la ligne (LWR : Line Wide Roughness), les parois présentent également une certaine rugosité (SWR : Side Wall Roughness). Il a été montré que ces rugosités ont une influence sur les propriétés électriques du circuit [7, 8], il est donc important de les caractériser. Actuellement la rugosité de ligne peut être caractérisée par microscopie électronique à balayage et pour les mêmes raisons que pour la partie périodique de la structure il serait intéressant de pouvoir le faire par des mesures optiques. Ceci nécessite une étude de l'influence de la rugosité sur la diffraction par des réseaux rugueux. Ce problème fondamental, de l'influence des défauts sur des structures périodiques, est riche en applications et a été peu étudié jusqu'à présent.

Notons enfin que ce travail théorique a été mené en parallèle avec d'autres travaux d'implémentation des outils expérimentaux de l'équipe, et en particulier l'amélioration du diffusomètre existant pour permettre des mesures dans tout l'espace, l'instrument étant placé dans une salle blanche (classe 100 000).

En plus des applications à la métrologie dans l'industrie de la microélectronique, la lumière est également un outil de choix pour sonder les milieux complexes qui diffusent la lumière. L'analyse de la lumière diffusée permet par exemple de déterminer si la diffusion est due à une rugosité d'interface ou à une hétérogénéité de volume [9]. L'analyse du speckle de la lumière diffusée permet également de distinguer les échantillons selon certaines de leur propriétés : pente moyenne d'une surface rugueuse [10], taille des grains d'une membrane de filtration [11], etc. En plus de constituer un fort intérêt en soi, ces applications nous permettent de valider notre outil de calcul, sur des problèmes bien maîtrisés par notre équipe, avant de passer à l'étude du problème plus singulier et peu étudié de la rugosité sur les réseaux. A l'institut Fresnel, l'équipe MAP2 possède en effet, depuis de nombreuses années une expertise dans ce domaine et son activité continue de s'étendre, outre les applications à la microélectronique, aux applications biomédicales et à l'imagerie du petit animal, où domine l'étude optique des tissus vivants à forte diffusion. Cette équipe a mis en oeuvre au cours des années précédentes, de nombreux codes perturbatifs pour traiter le cas des faibles diffusions caractéristiques des composants d'optique de précision : surfaces rugueuses, volumes hétérogènes, filtres et guides multicouches, microcavités luminescentes et lumière piégée... Ces outils théoriques présentent de multiples avantages, notamment parce qu'ils guident l'investigateur via des expressions analytiques (recherche de zéros ou pôles de diffusion, optimisation directe des multicouches...), et parce qu'ils s'appliquent aux cas tridimensionnel indispensables à l'expérimentateur, avec des temps de calcul négligeables qui facilitent la résolution de



problèmes inverses et donc la caractérisation des composants. Toutefois dans le cas des fortes diffusions provoquées par des structures à faible longueur de corrélation, ces modèles ne suffisent plus et des méthodes rigoureuses sont nécessaires.

La première partie de ce manuscrit est consacrée à la présentation de la méthode différentielle.

Dans le premier chapitre, nous présentons le cas des structures invariantes selon une dimension avec un plan d'incidence perpendiculaire à la direction d'invariance.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons deux améliorations numériques nécessaires au bon fonctionnement de la méthode différentielle : L'algorithme des matrices  $S$ , qui permet d'aborder des structures d'épaisseurs importantes et la factorisation rapide des séries de Fourier, améliorant considérablement la rapidité de convergence. Nous proposons en plus, une méthode d'intégration matricielle, permettant une amélioration considérable de la vitesse de calcul par rapport à la méthode de tir utilisée jusqu'alors. Nous validons ensuite notre code en le confrontant à d'autres méthodes de calcul (notamment la méthode intégrale et la méthode des sources fictives, développées à l'institut Fresnel).

Dans le troisième chapitre, nous présentons le cas de la diffraction conique, c'est à dire avec un plan d'incidence d'orientation quelconque.

Enfin, dans le chapitre quatre, nous présentons le cas tridimensionnel et sa mise en oeuvre qui a été rendu possible par une réduction du temps de calcul, grâce à l'utilisation de la méthode d'intégration matricielle. Ce code tridimensionnel est ensuite validé par comparaison à des résultats issus d'autres codes électromagnétiques rigoureux.

La deuxième partie concerne les applications de la méthode différentielle à l'étude de structures périodiques et non périodiques.

Dans le premier chapitre, nous présentons l'outil de mesure nous ayant servi à acquérir l'ensemble des données expérimentales présentées dans cette partie. Nous présentons ensuite les différences caractéristiques permettant de distinguer une diffusion par une rugosité de surface et par une inhomogénéité du matériau, en approfondissant le cas des fortes diffusions.

Dans le deuxième chapitre nous appliquons les résultats de la méthode différentielle à la procédure d'annulation sélective de la lumière diffusée récemment proposée par notre équipe [12]. Nous nous intéressons plus précisément au cas des fortes diffusions.

Le troisième chapitre est consacré aux applications à la métrologie des composants microélectroniques. Après avoir rappelé le contexte général de l'industrie microélectronique, nous présentons le principe de la mesure. Nous pré-

sentons ensuite quelques exemples de reconstruction dans le cas de structures simples, puis nous discutons le cas de structures plus complexes, y compris des structures tridimensionnelles et mettons en évidence l'apport de la méthode différentielle.

Enfin nous abordons le cas des réseaux rugueux. Nous montrons que les mesures de l'ordre 0 habituellement utilisées en microélectronique, ne sont pas adaptées à une caractérisation de la rugosité, par contre l'effet de la rugosité se retrouve clairement dans la lumière diffusée par la structure.



Première partie

**Outils pour le calcul de la  
diffraction et de la diffusion**



# Chapitre 1

## Méthode différentielle classique

La méthode différentielle est une technique qui est, et a été, largement utilisée pour le calcul de la diffraction par un réseau. Cette technique, apparue à la fin des années 1960 [13, 14], a connue de nombreuses évolutions depuis son origine et fait aujourd’hui partie des techniques de référence pour le calcul de la diffraction.

En se basant sur l’analogie entre les séries de Fourier d’une structure périodique et la transformation de Fourier d’une structure quelconque, il est possible d’étendre la méthode différentielle à des structures non périodiques [15, 16].

Par rapport à d’autres méthodes de calcul de la diffraction, la méthode différentielle a l’avantage de pouvoir traiter des structures complexes, constituées de différents matériaux dans des formes arbitraires. Elle est pour cette raison utilisée pour la reconstruction en métrologie de la microélectronique <sup>1</sup>. Elle se prête également au calcul de la diffusion par des structures arbitraires (surface rugueuse, matériau inhomogène en volume, etc.), dans le cas non périodique.

### 1 Les équations de Maxwell

Les grandes lois de l’électromagnétisme classique sur lesquelles s’appuie l’essentiel du travail présenté ici, ont été découvertes principalement au cours des XVIII<sup>e</sup> et XIX<sup>e</sup> siècles <sup>2</sup>, puis synthétisées et finalisées par Maxwell à la fin du XIX<sup>e</sup> <sup>3</sup>.

---

<sup>1</sup> C’est plus précisément la méthode RCWA, qui est un cas particulier de la méthode différentielle dont nous reparlerons au chapitre 2, qui est généralement utilisée dans ce cas.

<sup>2</sup> On peut citer notamment, la loi de la force électrique en  $1/r^2$  publiée par Coulomb en 1788, la découverte et la formulation du lien entre champ magnétique et courant électrique par Ampère en 1820 ou la découverte du phénomène d’induction par Faraday en 1831.

<sup>3</sup> Notons que leur formulation moderne est due à Heavyside et qu’on doit à Lorentz leur formulation dans les milieux matériels. On peut ajouter qu’au début du XX<sup>e</sup> siècle les lois de la relativité restreinte, contenues en germe dans les équations de Maxwell, ont donné un

### 1.1 Equations de Maxwell en régime transitoire

Dans leur formulation actuelle, les équations de Maxwell dans un milieu matériel, aussi appelées équations de Maxwell-Lorentz, font intervenir quatre grandeurs vectorielles, les champs électrique  $\mathbf{E}$ , magnétique  $\mathbf{B}$ , déplacement  $\mathbf{D}$  et induction  $\mathbf{H}$  qui s'écrivent en unités SI,

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \mathbf{D} = \rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \end{array} \right.$$

où  $\rho$  désigne la densité volumique de charge électrique et  $\mathbf{j}$  le vecteur densité de courant électrique.

### 1.2 Equations de Maxwell en régime harmonique

Si l'on suppose une dépendance temporelle en  $\exp(-i\omega t)$  des champs, ou plus généralement que l'on considère que les grandeurs  $A(\mathbf{r}, t)$  temporelles peuvent s'exprimer en fonction des grandeurs harmoniques  $A(\mathbf{r}, \omega)$  par le biais d'une transformation de Fourier

$$A(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

on peut écrire les équations de Maxwell sous leur forme harmonique,

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \mathbf{D} = \rho \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B} \\ \operatorname{div} \mathbf{H} = 0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{j} - i\omega \mathbf{D}, \end{array} \right.$$

où toutes les grandeurs sont maintenant des fonctions complexes de la pulsation  $\omega$  et de la variable d'espace  $\mathbf{r}$ .

### 1.3 Equations de Maxwell en régime harmonique pour des milieux linéaires, isotropes, non magnétiques, en l'absence de charge et de courant électriques

Pour des milieux non chargés et en l'absence de courant électrique, nous avons  $\rho = 0$  et  $\mathbf{j} = 0$ . De plus, nous étudierons des milieux considérés comme

---

éclairage nouveau sur l'électromagnétisme en particulier en permettant l'interprétation de la force magnétique comme un effet relativiste de la force électrique [17].

linéaires, isotropes et non magnétiques. Nous avons donc les relations constitutives,

$$\mathbf{D}(\omega) = \epsilon(\omega)\mathbf{E}(\omega) \quad (1.2)$$

et

$$\mathbf{B}(\omega) = \mu\mathbf{H}(\omega), \quad (1.3)$$

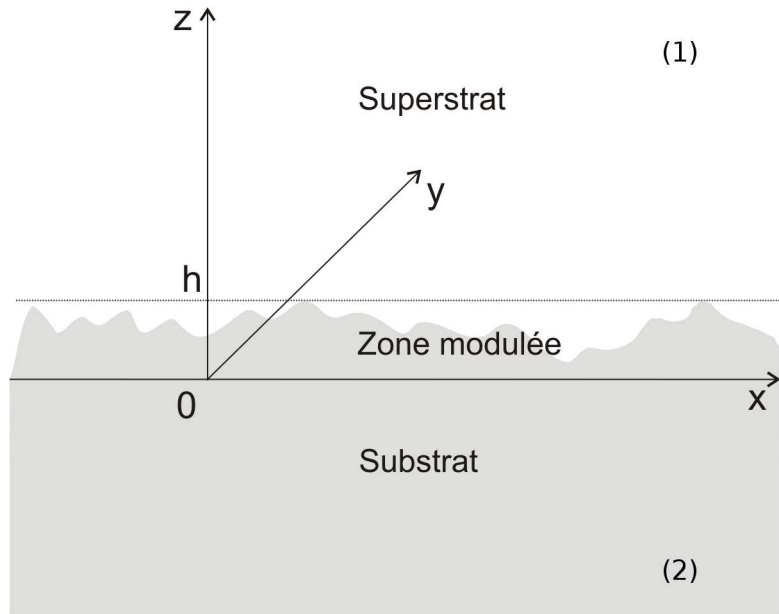
où  $\epsilon(\omega)$  désigne la permittivité électrique du milieu et  $\mu = \mu_0$ , la perméabilité magnétique du vide.

Dans ces conditions, en tenant compte de l'égalité  $\text{div}(\mathbf{rot}) = 0$ , les équations de Maxwell deviennent

$$\begin{cases} \mathbf{rot} \mathbf{E} = i\omega\mu_0\mathbf{H} \\ \mathbf{rot} \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E} \end{cases} \quad \begin{matrix} (1.4a) \\ (1.4b) \end{matrix}$$

## 2 Définition du problème

### 2.1 Structure et conditions d'éclairement



**Figure 1.1** Définition des axes de coordonnées cartésiennes

On cherche à déterminer le champ électromagnétique diffracté, en réflexion et en transmission, par une structure invariante selon une dimension. Le plan d'incidence est considéré perpendiculaire à la direction d'invariance de la structure (cas non conique) et le champ incident comme pouvant être décrit par une



onde plane ou par un faisceau d'ondes planes dont les vecteurs d'ondes sont entièrement compris dans le plan d'incidence.

On définit (Fig. 1.1) un trièdre direct  $(e_x, e_y, e_z)$ . La direction d'invariance est choisie parallèle à  $Oy$ , le plan d'incidence correspond au plan  $(Oxz)$  et l'onde incidente est considérée se propager dans le sens  $-e_z$ .

La structure diffractante est comprise entre  $z = 0$  et  $z = h$  (zone modulée) et est composée de matériaux isotropes et linéaires. Elle peut-être constituée par un matériau homogène dont la hauteur est modulée selon  $x$ , par une superposition de matériaux de modulation arbitraire ou par un milieu variant continûment, la seule contrainte étant de connaître son indice complexe de réflexion en tout point.<sup>4</sup>

Le superstrat (milieu 1) et le substrat (milieu 2) sont des milieux linéaires, homogènes et isotropes, respectivement situés en  $z > h$  et  $z < 0$ .

## 2.2 Découplage en TE et TM

L'invariance selon  $y$  entraîne la nullité des dérivées des champs  $E$  et  $H$  par rapport à  $y$  et le système d'équations (1.4) développé en coordonnées cartésiennes, se simplifie en

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu H_x \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu H_y \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} = i\omega\mu H_z \\ -\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\epsilon E_x \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\epsilon E_y \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} = -i\omega\epsilon E_z \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1.5a) \\ (1.5b) \\ (1.5c) \\ (1.5d) \\ (1.5e) \\ (1.5f) \end{array}$$

Ce système peut se découpler en deux sous systèmes indépendants. L'un faisant intervenir les grandeurs  $E_y$ ,  $H_x$  et  $H_z$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu H_x \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} = i\omega\mu H_z \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\epsilon E_y \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (1.6a) \\ (1.6b) \\ (1.6c) \end{array}$$

<sup>4</sup>Ceci constitue un atout majeur de la méthode différentielle par rapport à d'autres méthodes numériques exactes

et l'autre faisant intervenir les grandeurs  $H_y$ ,  $E_x$  et  $E_z$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu H_y \\ -\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\epsilon E_x \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} = -i\omega\epsilon E_z. \end{array} \right. \quad (1.7a)$$

$$(1.7b)$$

$$(1.7c)$$

Le problème de la diffraction pour une polarisation quelconque se décompose donc en deux sous problèmes indépendants. L'un, régi par les équations (1.6), correspondant à un champ  $E$  parallèle à  $e_y$ , c'est à dire à une polarisation TE (transverse électrique,  $E$  perpendiculaire au plan d'incidence), également nommée polarisation s. L'autre, régi par les équations (1.7), correspondant à un champ  $H$  parallèle à  $e_y$ , c'est à dire à une polarisation TM (transverse magnétique,  $H$  perpendiculaire au plan d'incidence), également nommée polarisation p.

### 2.3 Forme générale des champs en dehors de la zone modulée

En dehors de la zone modulée, les champs  $E$  et  $H$  variant continuellement, il est possible d'appliquer l'opérateur rotationnel à l'équation (1.4a) puis de combiner le résultat avec (1.4b) pour obtenir l'équation de Helmholtz vérifiée par le champ  $E$  <sup>5</sup>

$$\Delta E + k^2 E = 0, \quad (1.8)$$

où  $k^2 = \mu\epsilon\omega^2 = (2\pi\nu/\lambda)^2$  avec  $\nu = \sqrt{\epsilon_r\mu_r}$ , l'indice de réfraction du milieu.

Après transformation de Fourier selon  $x$ , définie comme

$$\tilde{F}(\sigma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(x) e^{-i\sigma x} dx \quad (1.9)$$

et en tenant compte du fait que le champ ne dépend pas de  $y$ , l'équation de Helmholtz devient

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}(\sigma, z)}{\partial z^2} + (k^2 - \sigma^2) \tilde{E}(\sigma, z) = 0, \quad (1.10)$$

la dérivée par rapport à  $x$  étant devenue une multiplication par  $i\sigma$  et les  $\tilde{E}$  représentant les transformées de Fourier du champ réel  $E$ .

L'équation différentielle du deuxième ordre (1.10) admet des solutions de la forme

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\sigma, z) &= \tilde{A}^-(\sigma) e^{-i\beta z} + \tilde{A}^+(\sigma) e^{i\beta z} \\ &= \tilde{E}^-(\sigma, z) + \tilde{E}^+(\sigma, z), \end{aligned} \quad (1.11)$$

<sup>5</sup>on utilise pour ce calcul la relation  $\mathbf{rot}(\mathbf{rot} \mathbf{A}) = -\Delta \mathbf{A} + \mathbf{grad}(\mathbf{div} \mathbf{A})$ .

où les vecteurs  $\tilde{A}^-(\sigma)$  et  $\tilde{A}^+(\sigma)$  contiennent les amplitudes complexes des composantes respectivement progressives et rétrogrades du champ et où l'on a posé  $\beta = \sqrt{k^2 - \sigma^2}$ .

Pour obtenir le champ  $E(x, z)$  dans l'espace réel, il suffit d'appliquer la transformation de Fourier inverse

$$F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{F}(\sigma) e^{i\sigma x} d\sigma$$

aux solutions  $\tilde{E}(\sigma, z)$  de (1.10), soit

$$E(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \tilde{A}^-(\sigma) e^{i(\sigma x - \beta z)} + \tilde{A}^+(\sigma) e^{i(\sigma x + \beta z)} \right] d\sigma. \quad (1.12)$$

En pratique, pour la résolution numérique, on travaillera sur un espace discrétisé en  $\sigma$ . La façon la plus simple et la plus générale<sup>6</sup> de discrétiser l'espace des  $\sigma$  étant de prendre un pas  $\Delta\sigma$  constant et de se centrer sur la fréquence spatiale du champ incident  $\sigma_0 = k \sin(\theta_i)$ , où  $\theta_i$  est l'angle d'incidence. Dans ces conditions, on a

$$\sigma = \sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma \quad (1.13)$$

et l'équation (1.12) devient

$$E(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ A_n^- e^{i(\sigma_n x - \beta_n z)} + A_n^+ e^{i(\sigma_n x + \beta_n z)} \right]. \quad (1.14)$$

où  $A_n^- = \Delta\sigma \tilde{A}^-(\sigma_n)$ ,  $A_n^+ = \Delta\sigma \tilde{A}^+(\sigma_n)$  et  $\beta_n = \sqrt{k^2 - \sigma_n^2}$ .

De la même façon que pour  $E$ , le champ  $H$  vérifie en milieu homogène l'équation de Helmholtz

$$\Delta H + k^2 H = 0, \quad (1.15)$$

et admet des solutions de la forme

$$H(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ B_n^- e^{i(\sigma_n x - \beta_n z)} + B_n^+ e^{i(\sigma_n x + \beta_n z)} \right] \quad (1.16)$$

après discrétisation en  $\sigma$ .

En général, on considère que la structure est éclairée seulement depuis le côté  $z > 0$ . Le champ incident et le champ sur le côté du substrat ne contiennent alors que des composantes progressives.

---

<sup>6</sup>La façon de discrétiser n'est pas unique et dans certains cas particuliers il pourra être intéressant de discrétiser avec un pas non constant [18].

### 3 Méthode différentielle classique en polarisation TE

#### 3.1 Equations du champ à l'intérieur de la zone modulée

En polarisation TE, le champ se résume à sa composante  $E_y \mathbf{e}_y$ , colinéaire à la direction d'invariance.  $E$  est donc toujours continu puisque parallèle à une quelconque interface présente à l'intérieur de la zone modulée, ce qui autorise l'utilisation de l'équation de Helmholtz pour décrire son évolution,

$$\Delta E + k^2 E = 0, \quad (1.17)$$

soit

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y(x, z) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} E_y(x, z) - k^2(x, z) E_y(x, z). \quad (1.18)$$

La détermination du champ  $E_y$  passe donc par la résolution de cette équation différentielle du deuxième ordre dans l'espace à deux dimensions,  $x \in [-\infty, +\infty]$  et  $z \in [0, h]$ . La fonction  $k(x, z) = 2\pi\nu(x, z)/\lambda$ , est une donnée du problème.

Il est possible de se ramener à un système d'équations différentielles portant sur la seule variable  $z$ , en effectuant une transformation de Fourier par rapport à la variable  $x$ ,

$$\tilde{A}(\sigma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} A(x) e^{-i\sigma x} dx, \quad (1.19)$$

sur l'ensemble de l'équation (1.18).

La dérivation par rapport à  $x$  devient alors une multiplication par  $i\sigma$  et le produit  $k^2(x, z) E_y(x, z)$  devient un produit de convolution. L'équation (1.18) devient,

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}_y(\sigma, z)}{\partial z^2} = \sigma^2 \tilde{E}_y(\sigma, z) - (\tilde{k}^2 * \tilde{E}_y)(\sigma, z), \quad (1.20)$$

où  $*$  désigne le produit de convolution défini par

$$(f * g)(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\sigma - \sigma') g(\sigma') d\sigma'$$

et où  $\tilde{E}_y(\sigma, z)$  et  $\tilde{k}^2(\sigma, z)$  désignent les transformées de Fourier de  $E_y(x, z)$  et de  $k^2(x, z)$ .

En explicitant le produit de convolution, l'équation (1.20) s'écrit,

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}_y}{\partial z^2}(\sigma, z) = \sigma^2 \tilde{E}_y(\sigma, z) - \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}^2(\sigma - \sigma', z) \tilde{E}_y(\sigma', z) d\sigma'. \quad (1.21)$$

En discrétisant l'espace des  $\sigma$  de la façon proposée au paragraphe 2.3, c'est à dire telle que  $\sigma \rightarrow \sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$  et  $\sigma' \rightarrow \sigma_m = \sigma_0 + m\Delta\sigma$  avec  $n, m \in \mathbb{N}$  et  $\sigma_0 = k \sin(\theta_i)$ , l'équation 1.21 devient un système infini d'équations différentielles couplées. Si on considère comme négligeables les termes du champ dont la fréquence spatiale  $\sigma$  est supérieure à un certain seuil  $\sigma_N$ , on peut tronquer le système et se ramener à un système fini d'équations différentielles,

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}_y}{\partial z^2}(n, z) = \sigma_n^2 \tilde{E}_y(n, z) - \sum_{m=-N}^{+N} \tilde{k}^2(n-m, z) \tilde{E}_y(m, z) \Delta\sigma, \quad (1.22)$$

soit,

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}_y}{\partial z^2}(n, z) = \sum_{m=-N}^{+N} \left[ \sigma_n^2 \delta_{n,m} - \Delta\sigma \tilde{k}^2(n-m, z) \right] \tilde{E}_y(m, z), \quad (1.23)$$

où  $n$  et  $m$  varient maintenant à l'intérieur de  $[-N, N]$  et où  $\delta_{n,m}$  désigne le symbole de Kronecker. Afin d'alléger l'écriture, on pose  $E_n = \Delta\sigma \tilde{E}_y(n, z)$  et  $k_n^2 = \Delta\sigma \tilde{k}^2(n, z)$ . On a ainsi

$$\frac{\partial^2 E_n}{\partial z^2} = \sum_{m=-N}^{+N} \left[ \sigma_n^2 \delta_{n,m} - k_{n-m}^2 \right] E_m. \quad (1.24)$$

Le champ à l'intérieur de la structure est donc décrit par un système de  $(2N+1)$  équations différentielles couplées du deuxième ordre. Ce système peut-être résolu par une méthode numérique d'intégration d'équation différentielle du deuxième ordre, par exemple la méthode Numerov[19], à condition de connaître les valeurs initiales du champ et de sa dérivée par rapport à  $z$  à l'une des deux extrémités de la zone modulée. Comme tout système d'équations différentielles d'ordre supérieur à 1, le système (1.24) peut également être ramené à un système d'ordre 1 par introduction de variables intermédiaires  $E'_n$  égales aux dérivées premières de  $E_n$  par rapport à  $z$ . Le système (1.24) s'écrit ainsi,

$$\begin{cases} \frac{\partial E_n}{\partial z} = E'_n & (1.25a) \\ \frac{\partial E'_n}{\partial z} = \sum_{m=-N}^{+N} \left[ \sigma_n^2 \delta_{n,m} - k_{n-m}^2 \right] E_m, & (1.25b) \end{cases}$$

ces équations devant être vérifiées quelle que soit la valeur de  $n$ , ce qui correspond pour  $n \in [-N, N]$  à un système de  $(4N+2)$  équations couplées.

On peut noter que l'équation (1.6) implique  $E'_n = -i\omega\mu H_n$ , avec  $H_n = \Delta\sigma \tilde{H}_x(\sigma_n)$ ,  $\tilde{H}_x(\sigma)$  étant la transformée de fourier de  $H_x(x)$ . Si l'on note  $H'_n =$

$\omega\mu H_n$ <sup>7</sup>, le système (1.25) s'écrit

$$\begin{cases} \frac{\partial E_n}{\partial z} = -iH'_n \\ \frac{\partial H'_n}{\partial z} = i \sum_{m=-N}^{+N} [\sigma_n^2 \delta_{n,m} - k_{n-m}^2] E_m, \end{cases} \quad (1.26a)$$

$$(1.26b)$$

Si l'on introduit les vecteurs  $[E]$  et  $[H']$  dont les composantes sont respectivement les  $E_n$  et  $H'_n$ ,

$$[E] = \begin{pmatrix} E_{-N} \\ \vdots \\ E_n \\ \vdots \\ E_N \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad [H'] = \begin{pmatrix} H'_{-N} \\ \vdots \\ H'_n \\ \vdots \\ H'_N \end{pmatrix},$$

et le vecteur  $[F]$  formé par la juxtaposition des vecteurs  $[E]$  et  $[H']$ ,

$$[F] = \begin{bmatrix} [E] \\ [H'] \end{bmatrix},$$

le système (1.25) s'écrit sous forme matricielle,

$$\frac{\partial}{\partial z}[F] = M[F], \quad (1.27)$$

où  $M$  est une matrice de taille  $(4N+2) \times (4N+2)$  pour  $n$  variant de  $-N$  à  $N$ .

La matrice  $M$  peut se décomposer en quatre blocs de taille  $(2N+1) \times (2N+1)$ ,

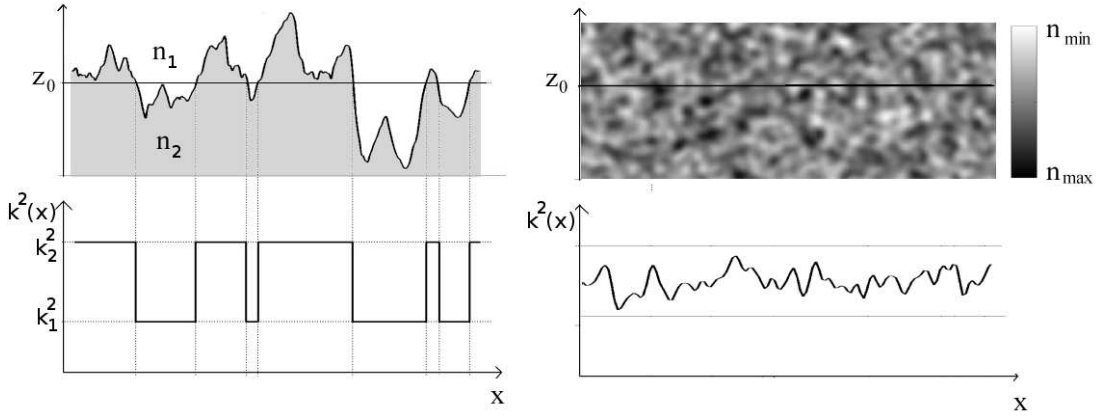
$$M = i \begin{pmatrix} 0 & -\text{Id} \\ M_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

Id désignant la matrice identité et  $M_{21}$  étant une matrice dont les éléments sont  $(M_{21})_{n,m} = \sigma_n^2 \delta_{n,m} - k_{n-m}^2$ .

La matrice  $M$  dépend de  $z$  par le biais de  $\tilde{k}^2(\sigma, z)$ , obtenu par transformation de Fourier de la fonction  $k^2(x, z)$  elle même déterminée à partir de l'indice de réfraction  $\nu(x, z)$  de la structure, voir figure 1.2.

Cette formulation matricielle présente l'avantage de la clarté et de la compacité et est bien adaptée à une programmation dans un langage de type Matlab où l'optimisation passe par la vectorisation du code. Par contre pour une programmation dans un langage de plus bas niveau, tel que le langage C, il est préférable d'utiliser directement les équations (1.25) afin de minimiser le nombre d'opérations.

<sup>7</sup>On choisit cette notation pour une raison d'harmonisation avec le cas TM et le cas conique.



**Figure 1.2** Illustration de la détermination de  $k^2(x, z)$ , dans le cas d'une surface rugueuse et dans le cas d'un matériau inhomogène en volume.

### 3.2 Champ en dehors de la zone modulée

En tenant compte de la polarisation TE et de la troncation entre  $-N$  et  $+N$ , l'équation (1.14), décrivant le champ  $E$  en dehors de la zone modulée, devient

$$E_y(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} \left[ A_n^- e^{i(\sigma_n x - \beta_n z)} + A_n^+ e^{i(\sigma_n x + \beta_n z)} \right] \quad (1.28a)$$

$$= \sum_{n=-N}^{+N} \left[ A_n^- e^{-i\beta_n z} + A_n^+ e^{i\beta_n z} \right] e^{i\sigma_n x} \quad (1.28b)$$

$$= \sum_{n=-N}^{+N} E_n e^{i\sigma_n x}, \quad (1.28c)$$

avec  $E_n = \Delta\sigma \tilde{E}_y(\sigma_n)$ . On a ainsi

$$E_n = A_n^- e^{-i\beta_n z} + A_n^+ e^{i\beta_n z} \quad (1.29a)$$

$$= E_n^- + E_n^+, \quad (1.29b)$$

où  $E_n^-$  représente la composante rétrograde (propagation dans le sens  $-\mathbf{e}_z$ ) et  $E_n^+$  la composante progressive (propagation dans le sens  $\mathbf{e}_z$ ).  $H'_n$  s'exprime à partir de la dérivée de  $E_n$  par rapport à  $z$ ,

$$H'_n = i \frac{\partial E_n}{\partial z} = \beta_n A_n^- e^{-i\beta_n z} - \beta_n A_n^+ e^{i\beta_n z} \quad (1.30a)$$

$$= \beta_n E_n^- - \beta_n E_n^+. \quad (1.30b)$$

Du côté du superstrat,  $z > h$ , le champ total  $\tilde{E}_y$  est la somme du champ incident et du champ diffracté en réflexion, ses composantes complexes  $E_n^h$

s'écrivent

$$\begin{aligned} E_n^h &= E_n^i + E_n^{h+} \\ &= A_n^i e^{-i\beta_n^h z} + A_n^{h+} e^{i\beta_n^h z}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

les  $A_n^i$  et  $A_n^{h+}$  représentant respectivement les amplitudes complexes des composantes du champ incident et du champ diffracté en réflexion et  $\beta_n^h$  étant défini par  $\beta_n^h = \sqrt{(2\pi\nu_1/\lambda)^2 - \sigma_n^2}$ , où  $\nu_1$  est l'indice de réfraction du superstrat. Si l'on souhaite représenter le champ incident par une onde plane, on choisira tous les  $A_n^i$  égaux à 0, sauf le terme  $n = 0$  (qui correspond à la fréquence spatiale  $\sigma_0 = k_1 \sin(\theta_i)$ )

Du côté du substrat,  $z < 0$ , si on considère la source du côté du superstrat, le champ se résume au champ diffracté transmis,

$$\begin{aligned} E_n^0 &= A_n^{0-} e^{-i\beta_n^0 z} \\ &= E_n^{0-} \end{aligned} \quad (1.32)$$

**Passage d'une représentation  $(E, E')$  à une représentation  $(E^-, E^+)$ .** On peut noter  $[E^-]$  et  $[E^+]$  les vecteurs formés des composantes  $E_n^-$  et  $E_n^+$ ,

$$[E^-] = \begin{pmatrix} E_{-N}^- \\ \vdots \\ E_n^- \\ \vdots \\ E_N^- \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad [E^+] = \begin{pmatrix} E_{-N}^+ \\ \vdots \\ E_n^+ \\ \vdots \\ E_N^+ \end{pmatrix},$$

et  $[V]$  le vecteur formé par la juxtaposition des vecteurs  $[E^-]$  et  $[E^+]$ ,

$$[V] = \begin{bmatrix} [E^-] \\ [E^+] \end{bmatrix}.$$

La représentation sous forme de vecteur  $[V]$  (composantes propagatives et rétrogrades) est celle qui nous intéresse en pratique car elle contient explicitement les composantes du champ incident, du champ diffracté en réflexion et du champ diffracté en transmission. La représentation sous forme de vecteur  $[F]$  (champ total et sa dérivée) est celle qui intervient dans les équations du champ (1.27).

D'après (1.29) et (1.30) on peut passer d'une représentation du champ sous forme de vecteur  $[V]$  à une représentation sous forme de vecteur  $[F]$  par multiplication par une matrice  $\Psi$ ,

$$[F] = \Psi[V],$$

avec

$$\Psi = \begin{pmatrix} \text{Id} & \text{Id} \\ \Psi_{21} & \Psi_{22} \end{pmatrix},$$



où  $\text{Id}$  représente la matrice identité et où  $\Psi_{21}$  et  $\Psi_{22}$  sont des matrices diagonales :

$$\Psi_{21} = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & \beta_n & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}, \text{ et } \Psi_{22} = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & -\beta_n & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}.$$

### 3.3 Existence d'une relation linéaire entre les solutions aux extrémités de la zone modulée

En utilisant l'équation (1.27), on peut écrire  $[F(0 + dz)]$  en fonction de  $[F(0)]$ ,

$$\begin{aligned} [F(0 + dz)] &= [F(0)] + M(0)[F(0)]dz \\ &= M'(0)[F(0)], \end{aligned}$$

avec  $M'(0) = \text{Id} + M(0)dz$ .<sup>8</sup>

Par itération sur les valeurs de  $z$ , on montre qu'il existe une matrice  $P$ <sup>9</sup> telle que

$$[F(h)] = P[F(0)]. \quad (1.33)$$

On peut en déduire, en utilisant (3.2), l'existence d'une matrice  $T$  telle que

$$[V(h)] = T[V(0)]. \quad (1.34)$$

### 3.4 Résolution des équations par méthode de tir

Le système (1.27) peut être résolu à l'aide d'une méthode numérique d'intégration d'équations différentielles du premier ordre à condition de connaître les conditions initiales. De nombreuses méthodes de résolution existent et sont disponibles sous forme de bibliothèques numériques (Gnu Scientific Library [20] ou ODEPACK [21] par exemples) ou sous forme de code source [22].

Les équations (1.31) et (1.32) décrivent la forme des champs aux extrémités de la zone modulée, mais les coefficients  $A_n^{h+}$  et  $A_n^{0-}$  n'étant pas connus a priori, les conditions initiales ne sont pas connues.

La méthode de tir, se base sur l'existence de la relation linéaire (1.33) entre  $[F(h)]$  et  $[F(0)]$  pour contourner le problème de l'absence de conditions initiales. Si l'on utilise comme conditions initiales arbitraires, un vecteur noté  $[F(0)]_n$  dont la  $n^{\text{ième}}$  composante vaut 1 et dont les autres composantes sont nulles, puis que l'on intègre le système (1.27) jusqu'en  $z = h$ , le vecteur  $[F(h)]$  obtenu sera égal à la  $n^{\text{ième}}$  colonne de la matrice  $P$ . On peut ainsi, en utilisant

<sup>8</sup>Cette façon d'itérer la solution est d'ailleurs celle utilisée par la méthode d'Euler.

<sup>9</sup>dont la valeur est  $P = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left[ \prod_{n=0}^{N-1} M'(n h / N) \right]$ .

autant de vecteurs indépendants  $[F(0)]_n$  qu'il y a de colonnes, reconstituer entièrement la matrice  $P$ .

On en déduit facilement la matrice  $T$

$$T = \Psi^{-1} P \Psi.$$

Si de plus, comme c'est le cas en général, il n'y a pas de source du côté du substrat,  $[E^{0+}] = 0$  et on a

$$\begin{aligned} [E^i] &= T_{11}[E^{0-}] \\ [E^{h+}] &= T_{12}[E^{0-}]. \end{aligned}$$

Si on appelle  $r$  et  $t$  les matrices permettant d'obtenir les champs diffractés en réflexion et en transmission en fonction du champ incident,

$$\begin{aligned} [E^{h+}] &= r [E^i] \\ [E^{0-}] &= t [E^i], \end{aligned}$$

leur expression s'obtient facilement en fonction de  $T_{11}$  et  $T_{12}$

$$t = T_{11}^{-1} \quad (1.35)$$

$$r = T_{12} T_{11}^{-1}. \quad (1.36)$$

## 4 Méthode différentielle classique en polarisation TM

### 4.1 Equations du champ

En prenant le rotationnel de (1.4b) et en combinant avec (1.4a), on obtient l'équation d'Helmholtz avec second membre pour le champ  $H$ ,

$$\Delta H + \omega^2 \mu \epsilon H = i\omega \mathbf{grad} \epsilon \wedge E. \quad (1.37)$$

En polarisation TM, cette équation se réduit à l'équation scalaire

$$\Delta H_y + \omega^2 \mu \epsilon H_y = i\omega \frac{\partial \epsilon}{\partial z} E_x - i\omega \frac{\partial \epsilon}{\partial x} E_z. \quad (1.38)$$

En exprimant, à l'aide de (1.7),  $E_x$  et  $E_z$  en fonction de  $\partial H_y / \partial z$  et  $\partial H_y / \partial x$ , l'équation (1.38) devient

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \frac{\partial H_y}{\partial z} = -\frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \omega^2 \mu \epsilon H_y \quad (1.39)$$

qui se simplifie en

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) - \omega^2 \mu H_y. \quad (1.40)$$

On peut se ramener à un système du premier ordre en faisant intervenir  $E_x = (1/i\omega\epsilon)\partial H_y/\partial z$

$$\begin{cases} \frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z} = H_y - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{k^2} \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{1}{i\omega\mu} k^2 E_x, \end{cases} \quad (1.41a)$$

$$(1.41b)$$

où on a posé  $k^2 = \omega^2 \mu \epsilon$ .

Comme en TE, on peut se ramener à un système d'équations différentielles portant sur la seule variable  $z$  en effectuant une transformation de Fourier selon  $x$ . (1.41) devient

$$\begin{cases} \frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z}(\sigma, z) = \tilde{H}_y(\sigma, z) + \sigma \left( \left( \frac{1}{k^2} \right) * (\sigma \tilde{H}_y) \right)(\sigma, z) \\ \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial z}(\sigma, z) = \frac{1}{i\omega\mu} (\tilde{k}^2 * \tilde{E}_x)(\sigma, z). \end{cases} \quad (1.42a)$$

$$(1.42b)$$

En posant  $\tilde{H}'_y = \omega\mu\tilde{H}_y$  pour alléger l'écriture et en explicitant le produit de convolution, on obtient

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z}(\sigma, z) = i\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma' \left( \frac{1}{k^2} \right) (\sigma - \sigma', z) \tilde{H}'_y(\sigma', z) d\sigma' \\ \quad + i\tilde{H}'_y(\sigma, z) \\ \frac{\partial \tilde{H}'_y}{\partial z}(\sigma, z) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}^2(\sigma - \sigma', z) \tilde{E}_x(\sigma', z) d\sigma' \end{cases} \quad (1.43a)$$

$$(1.43b)$$

Après discrétisation et troncation en  $\sigma$  et en posant  $E_n = \Delta\sigma\tilde{E}_x(\sigma_n, z)$ ,  $H'_n = \Delta\sigma\tilde{H}'_y(\sigma_n, z)$ ,  $k_{n-m}^2 = \Delta\sigma\tilde{k}^2(\sigma_n - \sigma_m)$  et  $\left( \frac{1}{k^2} \right)_{n,m} = \Delta\sigma \left( \frac{1}{k^2} \right)(\sigma_n - \sigma_m, z)$  avec  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ , on obtient

$$\begin{cases} \frac{\partial E_n}{\partial z} = iH'_n + i\sigma_n \sum_{m=-N}^{+N} \sigma_m \left( \frac{1}{k^2} \right)_{n-m} H'_m \\ \frac{\partial H'_n}{\partial z} = -i \sum_{m=-N}^{+N} (k^2)_{n-m} E_m. \end{cases} \quad (1.44a)$$

$$(1.44b)$$

Le champ en TM à l'intérieur de la zone modulée, est donc décrit par ce système de  $(4N + 2)$  équations couplées, portant sur les composantes de Fourier des quantités  $E_x$  et  $H_y$ .

## 4.2 Champ en dehors de la zone modulée

En TM, le champ  $H'_y(x, z)$  en dehors de la zone modulée s'écrit,

$$H'_y(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} \left[ B_n^- e^{-i\beta_n z} + B_n^+ e^{i\beta_n z} \right] e^{i\sigma_n x} \quad (1.45a)$$

$$= \sum_{n=-N}^{+N} H'_n e^{i\sigma_n x}, \quad (1.45b)$$

avec  $H'_n = \Delta\sigma \tilde{H}'_y(\sigma_n)$ . On a ainsi

$$H'_n = B_n^- e^{-i\beta_n z} + B_n^+ e^{i\beta_n z} \quad (1.46a)$$

$$= H_n'^- + H_n'^+, \quad (1.46b)$$

où  $H_n'^-$  désigne la composante rétrograde et  $H_n'^+$  la composante progressive.

Le champ  $E_x(x, z)$  s'exprime en fonction de  $H'_y(x, z)$

$$E_x(x, z) = -\frac{i\omega\mu}{k^2} \frac{\partial H_y}{\partial z}(x, z) = -\frac{i}{k^2} \frac{\partial H'_y}{\partial z}(x, z).$$

Ses composantes  $E_n = \Delta\sigma \tilde{E}_x(\sigma_n)$  s'écrivent donc

$$E_n = -\frac{\beta_n}{k^2} B_n^- e^{-i\beta_n z} + \frac{\beta_n}{k^2} B_n^+ e^{i\beta_n z} \quad (1.47a)$$

$$= -\frac{\beta_n}{k^2} H_n'^- + \frac{\beta_n}{k^2} H_n'^+. \quad (1.47b)$$

Si on définit les vecteurs  $[H']$  et  $[E]$  formés des composantes  $H_n$  et  $E_n$  et le vecteur  $[F]$  formé de la superposition de ces deux vecteurs,

$$[F] = \begin{bmatrix} [E] \\ [H'] \end{bmatrix}$$

et les vecteurs  $[H^-]$  et  $[H^+]$  formés des composantes  $H_n'^-$  et  $H_n'^+$  et le vecteur  $[V]$  formé de la superposition de ces deux vecteurs,

$$[V] = \begin{bmatrix} [H'^-] \\ [H'^+] \end{bmatrix}$$

on peut passer d'une représentation  $[V]$  à une représentation  $[F]$  à l'aide de la matrice  $\Psi$

$$[F] = \Psi[V],$$

avec

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{11} & \Psi_{12} \\ \text{Id} & \text{Id} \end{pmatrix},$$

où  $\text{Id}$  représente la matrice identité et où  $\Psi_{21}$  et  $\Psi_{22}$  sont des matrices diagonales :

$$\Psi_{11} = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & -\beta_n/k^2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad \Psi_{12} = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 \\ & \beta_n/k^2 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}.$$

### 4.3 Méthode de tir cas TM

De la même façon qu'en TE, il existe en TM une matrice reliant linéairement les solutions  $[F(h)]$  et  $[F(0)]$

$$[F(h)] = P[F(0)],$$

qui permet de résoudre les équations par une méthode de tir. La matrice  $T$  pour le cas TM en est déduite par

$$T = \Psi^{-1}P\Psi,$$

et les matrices réflexion et transmission sont données par les relations (1.35) et (1.36).

## 5 Distinction entre structures périodiques et non périodiques

Les calculs présentés jusqu'ici s'appliquent au cas général des structures non périodiques. Toutefois le cas des structures périodiques se traite habituellement à partir d'une décomposition directe en séries de Fourier. L'objet de ce paragraphe est de faire le lien avec ce traitement classique.

Dans le cas d'une structure périodique, de période  $L$  selon  $Ox$ , on montre [23, 24, 25] que le champ  $u(x, z)$  ( $u \equiv E$  ou  $H$ ) est pseudopériodique, c'est à dire que la fonction  $u(x, z) \exp(-i\sigma_0 x)$  est périodique de période  $L$ . En écrivant cette fonction sous forme d'une série de Fourier, on montre que le champ s'écrit sous la forme d'une pseudo série de Fourier,

$$u(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} u_n(z) e^{i(nK + \sigma_0)x}, \quad (1.48)$$

avec,

$$K = \frac{2\pi}{L} \quad \text{et} \quad \sigma_0 = \frac{2\pi\nu_1}{\lambda} \sin(\theta_i), \quad (1.49)$$

$\nu_1$  étant l'indice de réfraction du superstrat.

Dans le substrat et le superstrat, l'indice de réfraction est constant et on montre que le champ s'écrit sous forme d'une série de Rayleigh,

$$u(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ A_n^- e^{i(nK+\sigma_0)x-i\beta_n z} + A_n^+ e^{i(nK+\sigma_0)x+i\beta_n z} \right], \quad (1.50)$$

avec  $\beta_n^2 = k^2 - (nK + \sigma_0)^2$ .

### 5.1 Obtention du cas périodique à partir du cas général

Dans le cas d'une structure quelconque nous avons (1.12),

$$u(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \tilde{A}^-(\sigma) e^{i(\sigma x - \beta z)} + \tilde{A}^+(\sigma) e^{i(\sigma x + \beta z)} \right] d\sigma$$

et après discrétisation telle que  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ ,

$$u(x, z) = \Delta\sigma \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ \tilde{A}^-(\sigma_n) e^{i(\sigma_n x - \beta_n z)} + \tilde{A}^+(\sigma_n) e^{i(\sigma_n x + \beta_n z)} \right]. \quad (1.51)$$

On voit donc que cette forme discrétisée est analogue au développement en série de Rayleigh (1.50) des structures périodiques et il suffit de prendre

$$\begin{aligned} \tilde{A}^+(\sigma_n) &= A_n^+ / \Delta\sigma \\ \tilde{A}^-(\sigma_n) &= A_n^- / \Delta\sigma \\ \Delta\sigma &= 2\pi / L, \end{aligned} \quad (1.52)$$

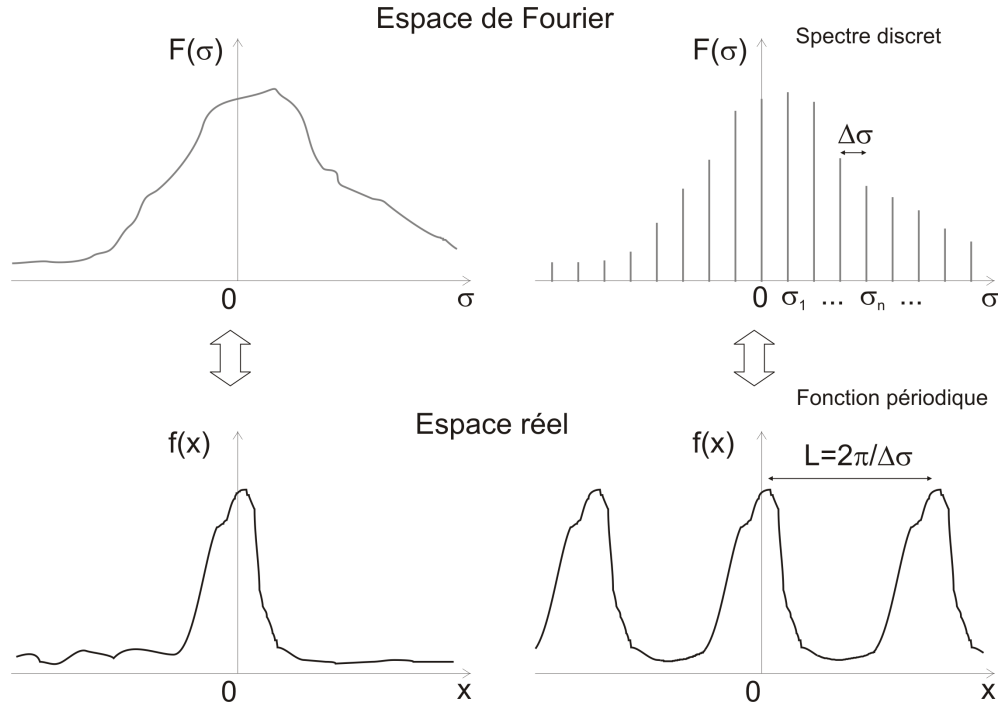
pour que les équations (1.50) et (1.51) s'identifient.

De même la discrétisation de la transformée de Fourier inverse du champ dans le cas général,

$$u(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u}(\sigma, z) e^{i\sigma x} d\sigma,$$

donne après discrétisation telle que  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ , la relation (1.48) décrivant la pseudo périodicité du champ pour une structure périodique, si l'on prend  $\Delta\sigma = 2\pi / L$  et  $\tilde{u}_n = u_n / \Delta\sigma$ .

On comprend donc que le choix de discrétisation que nous avons effectué rend le cas périodique et le cas non périodique très proches (et même équivalents comme nous allons le voir); notons néanmoins que ce choix de discrétisation n'est pas unique et que nous aurions pu prendre un pas en  $\sigma$  non constant, qui aurait fait que le cas non périodique discrétisé n'aurait pas été identique au cas périodique.



**Figure 1.3** La transformée de Fourier d'une fonction périodique est une fonction discrète. Réciproquement la transformée de Fourier inverse d'une fonction discrète, dont le pas de discrétisation est constant, est périodique.

## 5.2 Périodisation d'une structure non périodique par discrétisation dans l'espace de Fourier

La périodisation d'une structure par discrétisation dans l'espace de Fourier est illustrée figure 1.3.

Lors de la discrétisation des équations la transformée de Fourier  $\tilde{k}^2(\sigma)$  de  $k^2(x)$  devient une fonction de la variable discrète  $n\Delta\sigma$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .

Dans l'espace réel, la fonction  $k^2(x)$  est la transformée de Fourier inverse de  $\tilde{k}^2(\sigma)$  et du fait de la discrétisation s'écrit,

$$k^2(x) = \Delta\sigma \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \tilde{k}^2(n\Delta\sigma) e^{i(n\Delta\sigma x)}. \quad (1.53)$$

$k^2(x)$  s'écrit donc comme une somme de fonctions périodiques en  $x$ , dont les fréquences sont des multiples de  $\Delta\sigma/2\pi$  et est donc elle même une fonction de période,

$$L = \frac{2\pi}{\Delta\sigma}. \quad (1.54)$$

## 6 Expression de l'intensité diffractée

### 6.1 Cas général, structures non périodiques

Nous définissons l'intensité comme le flux du vecteur de Poynting par unité d'angle de diffusion, normalisé par le flux incident,

$$I(\theta) = \frac{1}{\Phi_0} \frac{d\Phi(\theta)}{d\theta}. \quad (1.55)$$

Le vecteur de Poynting complexe est défini par

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \wedge \mathbf{H}^* \quad (1.56)$$

et le champ étant sous forme d'ondes planes, on a entre  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{H}$ , la relation,

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{k} \wedge \mathbf{E}}{\omega\mu}. \quad (1.57)$$

Le champ diffracté s'écrit,

$$E(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{A}(\sigma) e^{i(\sigma x \pm \beta z)} d\sigma. \quad (1.58)$$

La densité spectrale de flux émis à la pulsation spatiale  $\sigma$  s'écrit

$$\frac{d\Phi(\sigma)}{d\sigma} = \frac{1}{2\omega\mu} |\tilde{A}(\sigma)|^2 |\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_z|, \quad (1.59)$$

dont on déduit la densité angulaire de flux dans la direction  $\theta$

$$\frac{d\Phi(\theta)}{d\theta} = \frac{k^2}{2\omega\mu} |\tilde{A}(\sigma)|^2 \cos^2(\theta). \quad (1.60)$$

Pour le flux incident,

$$\Phi_0 = \frac{1}{2\omega\mu} \int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} |\tilde{A}^0(\sigma)|^2 \beta(\sigma) d\sigma. \quad (1.61)$$

où  $\sigma_{\min}$  et  $\sigma_{\max}$  désignent les limites des ondes propagatives. Si l'on tient compte de la discrétisation,  $\Phi_0$  s'écrit

$$\Phi_0 = \frac{k_1}{2\omega\mu} \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} |\tilde{A}^0(\sigma_n)|^2 \cos(\theta_n) \Delta\sigma. \quad (1.62)$$

Dans le cas où le champ incident se résume à une seule onde plane et qu'on norme le coefficient  $\tilde{A}^0(\sigma_0)$  de telle sorte que

$$\int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} \tilde{A}^0(\sigma) d\sigma = 1, \quad (1.63)$$



soit, avec la discrétisation

$$\sum_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} \tilde{A}^0(\sigma_n) \Delta\sigma = 1, \quad (1.64)$$

le flux incident devient

$$\Phi_0 = \frac{1}{2\omega\mu} \frac{k_1 \cos(\theta_i)}{\Delta\sigma}. \quad (1.65)$$

Dans ces conditions, l'intensité du champ diffusé s'écrit

$$I(\theta) = \frac{1}{\Phi_0} \frac{d\Phi(\theta)}{d\theta} = \frac{k^2 \cos^2(\theta)}{k_1 \cos(\theta_i)} |\tilde{A}(\sigma)|^2 \Delta\sigma. \quad (1.66)$$

## 6.2 Cas des structures périodiques

L'efficacité  $e_n$  d'un ordre réfléchi ou transmis peut être défini comme le flux du vecteur de Poynting de cet ordre à travers une surface parallèle au plan moyen de la structure diffractante, normé par le flux incident à travers cette même surface,

$$e_n = \frac{\Phi_n}{\Phi_0}. \quad (1.67)$$

Le vecteur de Poynting complexe associé à l'ordre  $n$  est défini par

$$\mathcal{P}_n = \frac{1}{2} \mathbf{E}_n \wedge \mathbf{H}_n^*. \quad (1.68)$$

Dans le superstrat et le substrat, le champ étant sous forme d'ondes planes, on a entre  $\mathbf{E}_n$  et  $\mathbf{H}_n$ , la relation,

$$\mathbf{H}_n = \frac{\mathbf{k}_n \wedge \mathbf{E}_n}{\omega\mu}. \quad (1.69)$$

En polarisation TE, le champ diffracté s'écrit

$$E_y(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} A_n e^{i(nK + \sigma_0)x \pm i\beta z} \quad (1.70)$$

et le champ incident

$$E_y^0(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} A_n^0 e^{i(nK + \sigma_0)x - i\beta z}. \quad (1.71)$$

En général, on définit le champ incident tel que  $A_0^0 = 1$  et  $A_{n \neq 0}^0 = 0$ , ce qui conduit à

$$e_n = \frac{|A_n|^2 \beta_n}{\beta_0^{(1)}}, \quad (1.72)$$

avec  $\beta_0^{(1)} = k_1 \cos(\theta_i)$  et  $\beta_n = \sqrt{k^2 - (nK + \sigma_0)^2}$  où  $k = k_1$  ou  $k_2$  selon que l'on calcule l'efficacité en réflexion ou en transmission.

En polarisation TM, si on considère que le champ diffracté est donné par

$$H_y(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} B_n e^{i(nK + \sigma_0)x \pm i\beta_n z} \quad (1.73)$$

et le champ incident par

$$H_y^0(x, z) = \sum_{n=-N}^{+N} B_n^0 e^{i(nK + \sigma_0)x - i\beta_n z}, \quad (1.74)$$

alors, si le champ incident est défini tel que  $B_0^0 = 1$  et  $B_{n \neq 0}^0 = 0$ , on a

$$e_n = \frac{\nu_1^2}{\nu^2} \frac{|B_n|^2 \beta_n}{\beta_0^{(1)}}. \quad (1.75)$$

### 6.3 Cas d'une pseudo périodicité

Comme nous l'avons vu, avec la discrétisation dans l'espace de Fourier apparaît une périodicité artificielle dans l'espace réel. Regardons la relation entre les efficacités pour cette pseudo structure périodique et l'intensité par unité d'angle de diffusion.

Pour une structure périodique, la somme de l'énergie diffusée en réflexion ou en transmission, normée par le flux incident s'écrit

$$e_{totale} = \sum_n e_n. \quad (1.76)$$

Pour une structure non périodique, elle s'écrit

$$e_{totale} = \int_{\sigma} \frac{dI(\sigma)}{d\sigma} d\sigma \quad (1.77)$$

et après discrétisation

$$e_{totale} = \sum_n \frac{dI(\sigma_n)}{d\sigma} \Delta\sigma. \quad (1.78)$$

En identifiant (1.76) et (1.78), on voit que

$$e_n = \frac{dI(\sigma_n)}{d\sigma} \Delta\sigma, \quad (1.79)$$

soit

$$e_n = \frac{dI(\theta_n)}{d\theta} \frac{1}{k \cos(\theta)} \Delta\sigma. \quad (1.80)$$

Comme  $\Delta\sigma = 2\pi/L$ ,  $L$  étant la période créée par la discrétisation et  $k = 2\pi\nu/\lambda$ , on a

$$\frac{dI(\theta_n)}{d\theta} = \frac{L}{\lambda} \nu \cos(\theta) e_n. \quad (1.81)$$



## Chapitre 2

# Formulation stable et efficace des algorithmes et validation

La formulation de la méthode différentielle présentée dans le chapitre précédent donne des résultats satisfaisants dans certains cas mais présente plusieurs limitations fondamentales.

La première limitation est que les résultats deviennent faux à partir d'une certaine épaisseur (typiquement de l'ordre de  $\lambda/5$ ), bien qu'aucune hypothèse n'ait été faite à ce niveau pour l'obtention des équations. Il s'agit en fait d'un problème numérique qui fut compris et réglé au cours des années 1990 et dont nous présentons une solution : l'algorithme des matrices  $S$  [26].

La deuxième limitation concerne la lente convergence des résultats en polarisation TM, en particulier pour les structures métalliques. Une solution à ce problème fut trouvée au cours des années 1990 et 2000 [27, 28, 3, 6] grâce à une reformulation des équations tenant compte d'une écriture adaptée des produits de convolution en fonction de la continuité des fonctions.

Enfin une troisième limitation est la durée importante des calculs par rapport à d'autres méthodes, telles que la méthode intégrale ou la méthode RCWA. Pour résoudre ce problème, nous proposons un algorithme matriciel d'intégration, remplaçant la méthode de tir et permettant typiquement de gagner plusieurs ordre de grandeur en vitesse de calcul.

Une fois ces améliorations incluses dans notre code, nous présentons sa validation en le confrontant aux lois de la physique (conservation de l'énergie), de l'électromagnétisme (théorème de réciprocité) ainsi qu'à des calculs issus d'autres méthodes électromagnétiques.

# 1 Algorithme des matrices $S$

## 1.1 Illustration de l'instabilité numérique

Une condition nécessaire à la justesse du calcul est la conservation de l'énergie totale, ce qui se traduit pour une structure diélectrique (transparente), par un rapport entre l'énergie totale du champ diffracté et l'énergie du champ incident égal à 1. Or on constate, qu'avec la formulation donnée au chapitre précédent, la conservation de l'énergie n'est plus respectée à partir d'une certaine épaisseur.

La figure 2.1 illustre ce phénomène en montrant la conservation de l'énergie, calculée dans le cas d'un réseau, en fonction de son épaisseur. Pour une épaisseur de l'ordre de  $\lambda/10$  l'erreur sur le bilan d'énergie est inférieure à  $10^{-14}$ . Cette erreur augmente ensuite très rapidement avec l'épaisseur et atteint une valeur supérieure à 100% pour une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde.

L'origine de cette instabilité est généralement attribuée à la présence de termes en  $\exp(-i\beta z)$  dans la matrice  $T_A$  [25, 26]. En effet,  $\beta$  possédant une partie imaginaire non nulle, pour les composantes évanescentes dans le cas d'un matériau diélectrique ou pour l'ensemble des composantes dans le cas d'un matériau métallique ou absorbant, l'exponentielle croît rapidement avec  $z$ <sup>1</sup>. A partir d'une certaine épaisseur, la matrice  $T_A$  comporte des valeurs dont les ordres de grandeurs sont très différents entre eux, ce qui conduit à une faible précision numérique lors de son inversion, intervenant pour le calcul de l'intensité.

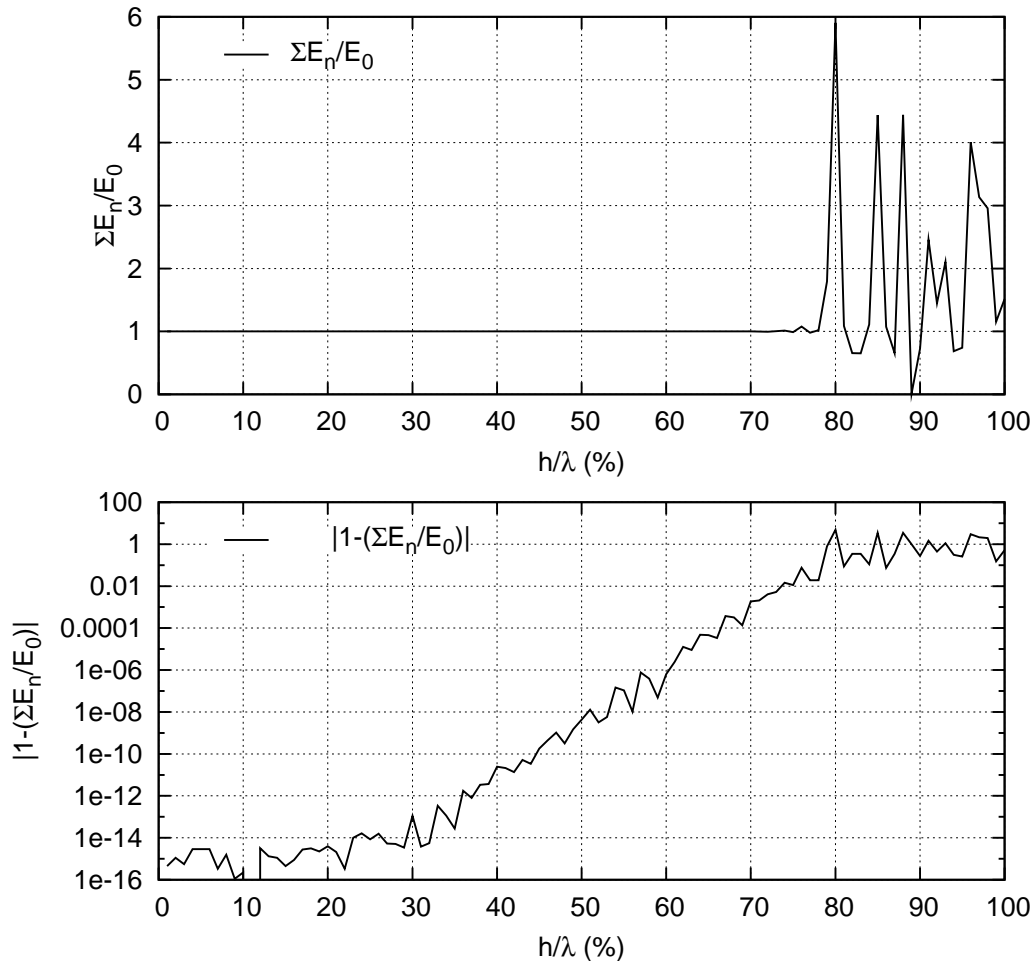
La solution consiste à fragmenter le calcul en tranches suffisamment faibles, en veillant à utiliser un algorithme qui ne propage pas les contaminations numériques d'une tranche à l'autre.

## 1.2 Matrices $T$

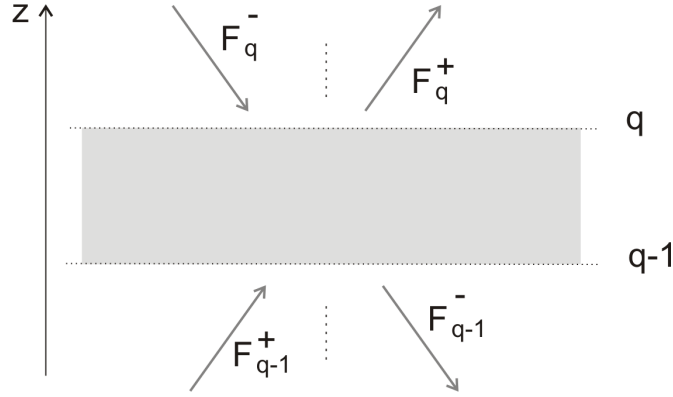
On décompose la structure qui nous intéresse en plusieurs sous-couches, selon un découpage perpendiculaire à  $(Oz)$ . Comme dans la plupart des cas ce découpage est réalisé pour des raisons numériques, il ne correspond pas nécessairement à quelque chose de particulier dans la structure réelle<sup>2</sup>. A l'interface entre chaque sous-couche on considère une couche infiniment fine d'un matériau homogène (par exemple de l'air), ce qui permet d'avoir une valeur

<sup>1</sup>On vérifie la bonne conservation de l'énergie lorsqu'on ne prend en compte que des ondes propagatives, dans le cas d'une structure diélectrique, y compris pour des épaisseurs de plusieurs fois la longueur d'onde et avec une très bonne précision.

<sup>2</sup>Ceci est vrai pour la méthode différentielle mais pas pour la méthode RCWA lorsque cette dernière est appliquée à des structures en marches d'escaliers ; dans ce cas le découpage doit inclure chaque marche.



**Figure 2.1** Conservation de l'énergie en fonction de l'épaisseur  $h$  d'un réseau lamellaire de période  $L = 1,5\lambda$ , d'indice de réfraction  $n = 1,5$ , éclairé en incidence normale, en polarisation TE et avec  $N = 15$  (31 harmoniques). En haut : rapport de la totalité de l'énergie diffractée et de l'énergie incidente. En bas : taux d'énergie non conservée, en échelle logarithmique.



**Figure 2.2** Définition de la matrice  $T$  d'une couche.

déterminée pour l'indice de réfraction, ceci étant nécessaire pour passer d'une description (*champ total ; dérivée du champ total*) à une description (*composante progressive ; composante rétrograde*).

Au niveau de l'interface  $q$ , le champ peut-être décrit par les vecteurs  $F_q^-$  et  $F_q^+$  constitués de l'ensemble des composantes fréquentielles, respectivement progressives (sens  $-z$ ) et rétrograde (sens  $+z$ ),

$$F_q^- = \begin{pmatrix} F_{q,-N}^- \\ \vdots \\ F_{q,n-1}^- \\ F_{q,n}^- \\ F_{q,n+1}^- \\ \vdots \\ F_{q,N}^- \end{pmatrix} \text{ et } F_q^+ = \begin{pmatrix} F_{q,-N}^+ \\ \vdots \\ F_{q,n-1}^+ \\ F_{q,n}^+ \\ F_{q,n+1}^+ \\ \vdots \\ F_{q,N}^+ \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

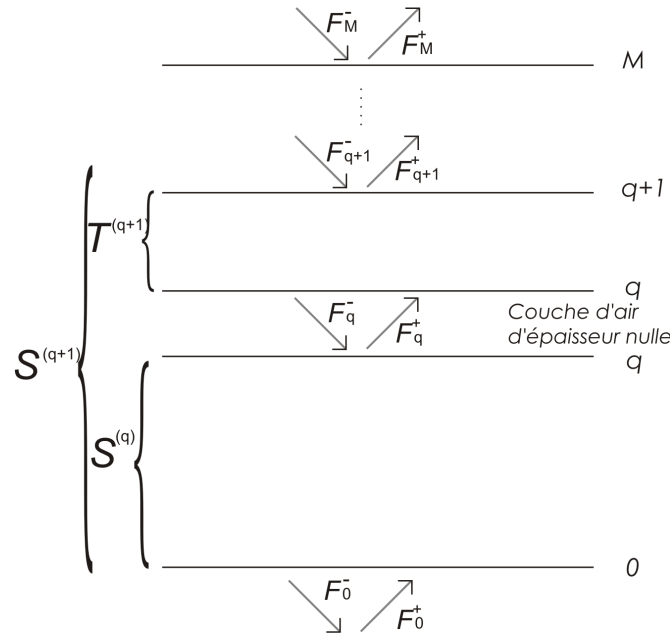
Par définition, la matrice  $T^{(q)}$  lie le champ en  $(q-1)$  au champ en  $q$  (cf. Fig. 2.2),

$$\begin{bmatrix} F_q^- \\ F_q^+ \end{bmatrix} = T^{(q)} \begin{bmatrix} F_{q-1}^- \\ F_{q-1}^+ \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

$T^{(q)}$ , pouvant se décomposer en quatre sous matrices,

$$T^{(q)} = \begin{bmatrix} T_{11}^{(q)} & T_{12}^{(q)} \\ T_{21}^{(q)} & T_{22}^{(q)} \end{bmatrix},$$

chacune étant de taille  $(2N+1, 2N+1)$  lorsque la troncation est faite entre  $-N$  et  $+N$ .



**Figure 2.3** Relation de récursion entre les matrices  $S^{(q+1)}$  et  $S^{(q)}$ .

La matrice  $T$  d'un ensemble de sous couches  $(1, 2, \dots, n)$  s'obtient simplement par le produit des matrices  $T$  de chaque sous couche,

$$T = T^{(1)} T^{(2)} \dots T^{(n)} \quad (2.3)$$

Les termes en  $\exp(-i\beta z)$  responsables de la perte de précision lorsque la partie imaginaire de  $\beta$  est supérieure à zéro, se trouvent dans le bloc  $T_{11}$ <sup>3</sup>. Lors du produit entre deux matrices  $T^{(1)}$  et  $T^{(2)}$ , le bloc  $T_{11}$  obtenu est composé notamment de  $T_{11}^{(1)} T_{11}^{(2)}$ , c'est à dire des produits des termes exponentiels. Les termes responsables de la perte de précision augmentent donc de la même façon que l'on utilise ou non le découpage en matrices  $T$ .

Il est cependant possible d'utiliser les matrices  $T$  de chaque sous-couche, à condition de les combiner en utilisant un algorithme qui ne propage pas les erreurs.

### 1.3 Matrices $S$

La matrice  $S^{(q)}$  des  $q$  couches situées entre les interfaces 0 et  $q$  est définie (cf. Fig. 2.3) par

$$\begin{bmatrix} F_q^+ \\ F_0^- \end{bmatrix} = S^{(q)} \begin{bmatrix} F_0^+ \\ F_q^- \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

<sup>3</sup>Dans le cas de structures quelconques il est difficile de faire apparaître explicitement ces termes, par contre on montre facilement leur présence dans le cas d'empilements de couches minces et dans le cas de structures lamellaires, en se plaçant dans la base des fonctions propres.



$S^{(q)}$  pouvant se décomposer en 4 sous matrices,

$$S^{(q)} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(q)} & S_{12}^{(q)} \\ S_{21}^{(q)} & S_{22}^{(q)} \end{bmatrix}.$$

De même, la matrice  $S^{(q+1)}$  s'écrit

$$\begin{bmatrix} F_{q+1}^+ \\ F_0^- \end{bmatrix} = S^{(q+1)} \begin{bmatrix} F_0^+ \\ F_{q+1}^- \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

avec,

$$S^{(q+1)} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(q+1)} & S_{12}^{(q+1)} \\ S_{21}^{(q+1)} & S_{22}^{(q+1)} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Un des avantages de cette formulation, en plus de sa stabilité numérique, est l'interprétation physique qu'on peut donner aux éléments de la matrice  $S$ . Une fois la matrice  $S$  de l'ensemble de la structure diffractante obtenue, on voit que le champ diffracté en réflexion est donné par le produit du bloc  $S_{12}$  avec le vecteur représentant le champ incident et le champ diffracté en transmission par le produit du bloc  $S_{22}$  avec le vecteur champ incident.

L'algorithme des matrices  $S$  est un algorithme récursif qui permet de passer de la matrice  $S^{(q)}$  à la matrice  $S^{(q+1)}$  à l'aide des valeurs de la matrice  $T^{(q+1)}$ .

En développant les relations (2.4), (2.5) et (2.2) et en remplaçant l'indice  $q$  par  $(q+1)$  dans cette dernière, on obtient (cf. Annexe A) 6 équations permettant d'aboutir aux relations récursives suivantes :

$$\begin{aligned} S_{11}^{(q+1)} &= (T_{22}^{(q+1)} - S_{12}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)}) S_{11}^{(q)} \\ S_{12}^{(q+1)} &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) Z(q) \\ S_{21}^{(q+1)} &= S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \\ S_{22}^{(q+1)} &= S_{22}^{(q)} Z(q) \end{aligned} \quad (2.7)$$

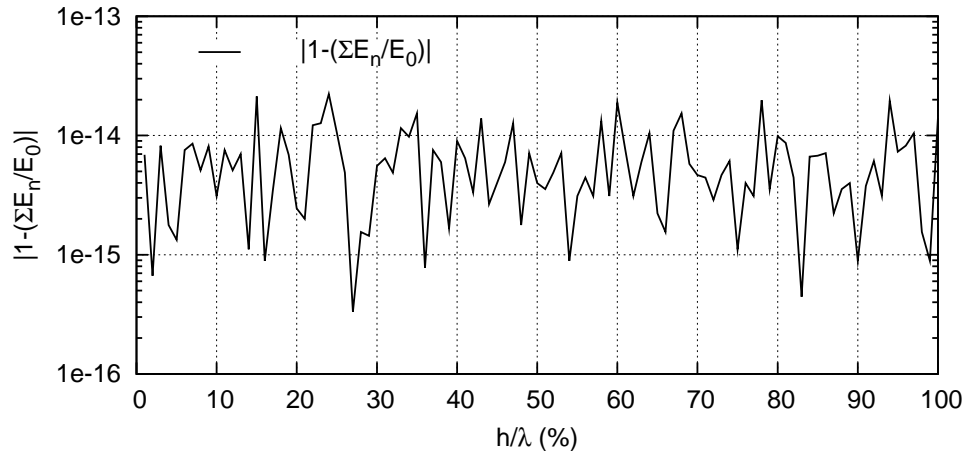
où,

$$Z(q) = [T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}]^{-1}. \quad (2.8)$$

Dans la plupart des cas, on considère qu'il n'y a aucune source de lumière du côté du substrat de sorte que seuls les blocs  $S_{12}$  et  $S_{22}$  nous intéressent. Les éléments de la matrice  $T$  sont obtenus à l'aide de la méthode différentielle et l'algorithme est initialisé avec la matrice  $S$  d'une couche de vide d'épaisseur nulle dont la matrice  $S_{12}$  vaut 0 (réflexion nulle) et la matrice  $S_{22}$  vaut Id (transmission totale).

## 1.4 Stabilité numérique de l'algorithme des matrices $S$

Pour illustrer la stabilité de la formulation utilisant les matrices  $S$  (Fig. 2.4), on répète le calcul de la figure 2.1, en découpant cette fois la structure en 10



**Figure 2.4** Conservation de l'énergie dans le même cas que pour la figure 2.1 mais en utilisant l'algorithme des matrices  $S$  avec 10 tranches d'égaies épaisseurs

matrices  $T$  (de sorte que  $h/\lambda$  ne dépasse pas 10%) et en les combinant par l'algorithme des matrices  $S$ . On constate que l'erreur sur le bilan d'énergie reste de l'ordre de  $10^{-14}$  à  $10^{-15}$ , ce qui est proche de la précision de l'ordinateur.

Dans l'algorithme des matrices  $S$ , les matrices  $T_{11}$  responsables de l'instabilité numérique sont inversées à chaque itération (équations (2.7) et (2.8)), ce qui évite la propagation des termes divergents, et permet la stabilité globale de l'algorithme du moment que les tranches sont suffisamment fines.

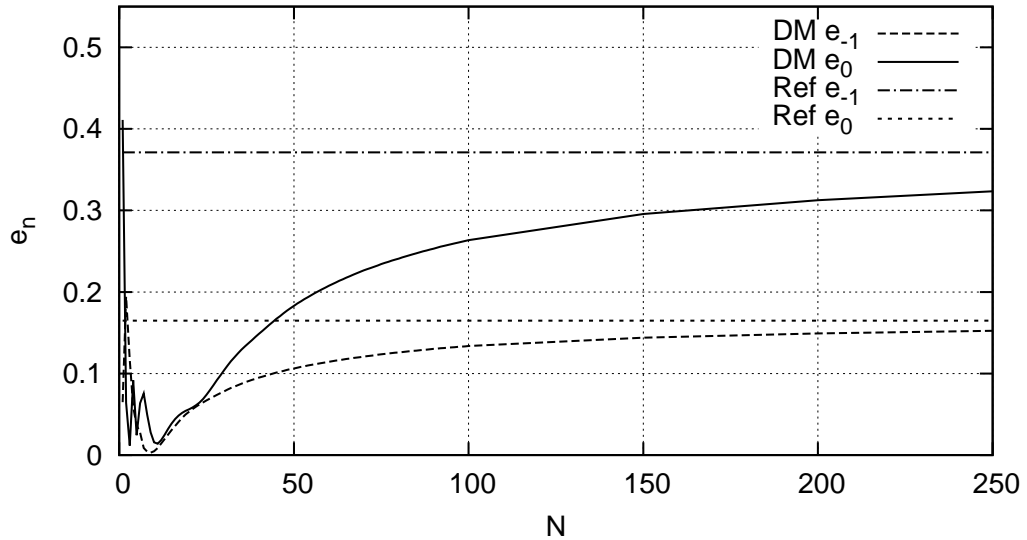
Pour la méthode différentielle, la durée du calcul est peu influencée par le nombre de matrices  $T$  utilisées dans le découpage<sup>4</sup>, il est donc peu gênant d'en prendre un nombre supérieur à ce que l'on estime nécessaire si l'on souhaite éviter de faire des tests de convergence sur ce paramètre. C'est différent dans le cas de la méthode RCWA où la durée du calcul est directement proportionnelle aux nombre de matrices utilisées dans le découpage.

## 2 Factorisation des séries de Fourier

En polarisation TM, la formulation du paragraphe 4.1 du chapitre 1 conduit (cf. Fig. 2.5) à une convergence très lente vis à vis du nombre d'harmoniques. Cet effet est particulièrement fort pour les structures métalliques. En polarisation TE, ce problème de convergence n'est pas observé. Sachant que, dans le cas de la formulation du paragraphe 4.1 du chapitre 1, la durée du calcul est un polynôme de degré 4 en  $N$ , il est difficile d'atteindre des valeurs de  $N$  de

<sup>4</sup>Ceci est particulièrement vrai quand les équations sont résolues par la méthode de tir, un peu moins quand la méthode matricielle est utilisée en raison de la rapidité de cette dernière.

l'ordre de 300 ou 400 (600 ou 800 harmoniques) ce qui, dans le cas métallique, n'est pas suffisant pour atteindre une précision satisfaisante.



**Figure 2.5** Efficacités des ordres -1 et 0 en polarisation TM, obtenues à partir de la formulation (1.44), en fonction de  $N$ . Les valeurs asymptotiques de référence sont obtenues par la méthode des sources fictives [29] et la méthode intégrale [30, 31] (mêmes valeurs à 0,0001 près), publiées dans [32]. Le réseau étudié est un réseau sinusoïdal en aluminium, de période  $0,833333 \mu\text{m}$ , de hauteur  $0,8 \mu\text{m}$ , d'indice de réfraction  $1,3+i7,1$ , pour une longueur d'onde de  $0,6 \mu\text{m}$ , en incidence normale.

En 1995-96, P. Lalanne et al. [27] et G. Granet et al. [28] découvrirent qu'une reformulation des produits de convolution tronqués conduisait, dans le cas de réseaux lamellaires, à une convergence considérablement améliorée en polarisation TM.

L. Li donna par la suite une base théorique à ces reformulations et établit les règles d'écriture correctes d'un produit de convolution dans le cas de séries de Fourier tronquées [3].

En 2000 E. Popov et M. Nevière réussirent à appliquer les règles de factorisation de Li à des réseaux classiques de forme arbitraires [4] puis, en 2001, à des réseaux, périodiques selon deux ou trois dimensions, de formes arbitraires [6].

## 2.1 Règles de factorisation de L. Li

Le produit de convolution de deux fonctions, après discrétisation de l'espace de Fourier selon (1.13) s'écrit habituellement (règle de Laurent)

$$h_n = \sum_{-\infty}^{+\infty} f_{n-m} g_m.$$

Cette formulation est exacte tant que  $n$  court de  $-\infty$  à  $+\infty$ . Par contre, si le domaine de variation de  $n$  est tronqué et en présence de discontinuités des fonctions  $f(x)$  et  $g(x)$ , cette façon d'écrire le produit de convolution n'est pas forcément la meilleure.

Les règles de factorisation correctes sont les suivantes :

- Le produit de deux fonctions  $f(x)$  et  $g(x)$  peut être factorisé à l'aide de la règle de Laurent si les fonctions n'ont aucune discontinuité concomitante (à la même abscisse  $x$  pour les deux fonctions)

$$h_n = \sum_{-N}^{+N} f_{n-m} g_m. \quad (2.9)$$

- Le produit de deux fonctions  $f(x)$  et  $g(x)$  ayant des discontinuités concomitantes mais dont le produit  $f(x)g(x)$  reste continu au moment de la discontinuité des deux fonctions, doit être factorisé par la règle inverse,

$$h_n = \sum_{-N}^{+N} \left[ \frac{1}{f} \right]_{n-m}^{-1} g_m. \quad (2.10)$$

- Le produit de deux fonctions  $f(x)$  et  $g(x)$  ayant des discontinuités concomitantes et dont le produit  $f(x)g(x)$  est discontinu au moment de la discontinuité des deux fonctions, ne peut être factorisé ni par la règle de Laurent ni par la règle inverse.

Sous forme matricielle, la factorisation directe (2.9) peut s'écrire

$$[h] = \llbracket f \rrbracket [g]$$

et la factorisation inverse (2.10),

$$[h] = \left[ \left[ \frac{1}{f} \right] \right]^{-1} [g].$$

$[a]$  représente le vecteur composé des composantes de Fourier tronquées entre  $-N$  et  $N$  de la grandeur  $a$  et  $\llbracket b \rrbracket$  représente la matrice de Toeplitz composée des éléments  $b_{n,m}$  égaux à la composante de Fourier de fréquence spatiale  $(\sigma_n - \sigma_m)$  de la grandeur  $b$ .

Ces notations vectorielles et matricielles, dans lesquelles la troncation est implicite, doivent être utilisées pour le développement des équations, car l'écriture correcte dépend du fait que ces grandeurs sont tronquées (règles de Li).

## 2.2 Réécriture des équations en polarisation TM

Les équations (1.41), qui régissent le champ en polarisation TM, font apparaître le produit  $k^2 E_x \propto \epsilon E_x$ , qui devient ensuite un produit de convolution dans l'espace de Fourier.

Au passage d'une interface,  $\epsilon(x)$  est discontinu et la continuité de  $E_x(x)$  dépend de l'orientation de l'interface.

Si l'on définit (figure 2.6) les vecteurs champ électrique normal  $E_N$  et champ électrique tangentiel  $E_T$ , leurs normes  $E_N$  et  $E_T$  s'expriment, sachant que  $E_y = 0$ , par

$$E_N = -\sin \theta_N E_x + \cos \theta_N E_z$$

$$E_T = \cos \theta_N E_x + \sin \theta_N E_z$$

et les composantes  $E_x$  et  $E_z$  s'expriment à leur tour en fonction de  $E_T$  et  $E_N$ ,

$$E_x = \cos \theta_N E_T - \sin \theta_N E_N$$

$$E_z = \sin \theta_N E_T + \cos \theta_N E_N.$$

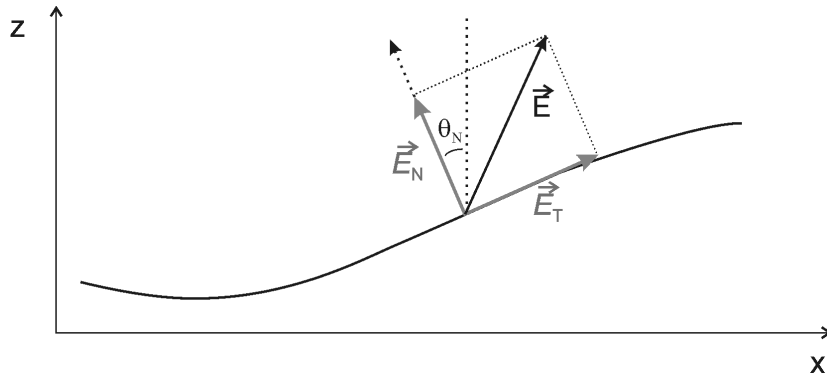
Pour alléger l'écriture on pose  $s = \sin \theta_N$  et  $c = \cos \theta_N$ . Pour la suite nous aurons besoin que les fonctions  $E_T(x, z)$  et  $E_N(x, z)$  soit définies quels que soient  $x$  et  $z$  au sein de la structure.  $E_N$  et  $E_T$  s'identifient donc avec les composantes normale et tangentielle du champ  $E$ , pour les points situés sur l'interface, et correspondent à une décomposition arbitraire en dehors de l'interface. Si l'interface est décrite par une fonction continue  $z = f(x)$ , les valeurs de  $c(x, z)$  et  $s(x, z)$ , pour les points situés sur l'interface, sont données par

$$c(x, f(x)) = \sqrt{\frac{1}{1 + (\partial f / \partial x)^2}} \quad (2.11)$$

et

$$s(x, f(x)) = \sqrt{\frac{1}{1 + (\partial f / \partial x)^2}} \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (2.12)$$

Une façon simple, mais non unique, de définir un prolongement de ces fonctions à l'ensemble des points de la structure est de considérer que  $c(x, z) = c(x, f(x)) \forall z$  et  $s(x, z) = s(x, f(x)) \forall z$ , autrement dit que  $c(x, z)$  et  $s(x, z)$  sont constantes selon  $z$  et égales aux valeurs données par (2.11) et (2.12). Si l'on choisi une autre façon de prolonger ces fonctions, on doit veiller à ce qu'elles



**Figure 2.6** Décomposition du champ  $E$  en ses composantes normale et tangentielle à la surface.

soient continues selon  $x$ , pour les valeurs  $x_i$  correspondant à un passage au travers de l'interface, afin de pouvoir appliquer les bonnes règles de factorisation par la suite.

En utilisant cette décomposition en composantes normale et tangentielle, le produit  $\epsilon E_x$  intervenant dans les équations (1.41) s'écrit

$$\epsilon E_x = \epsilon c E_T - \epsilon s E_N. \quad (2.13)$$

Au passage d'une interface, la fonction  $E_T(x)$  est continue,  $E_N(x)$  et  $\epsilon(x)$  sont discontinues et  $\epsilon(x)E_N(x)$  est continue. Après transformation de Fourier, discrétisation et troncation l'équation (2.13) s'écrit

$$[\epsilon E_x] = [\epsilon c E_T] - [\epsilon s E_N]$$

et les règles de Li conduisent à

$$[\epsilon E_x] = [\epsilon][c E_T] - \left[\left[\frac{1}{\epsilon}\right]\right]^{-1} [s E_N].$$

En écrivant  $E_T$  et  $E_N$  en fonction de  $E_x$  et  $E_z$  on a

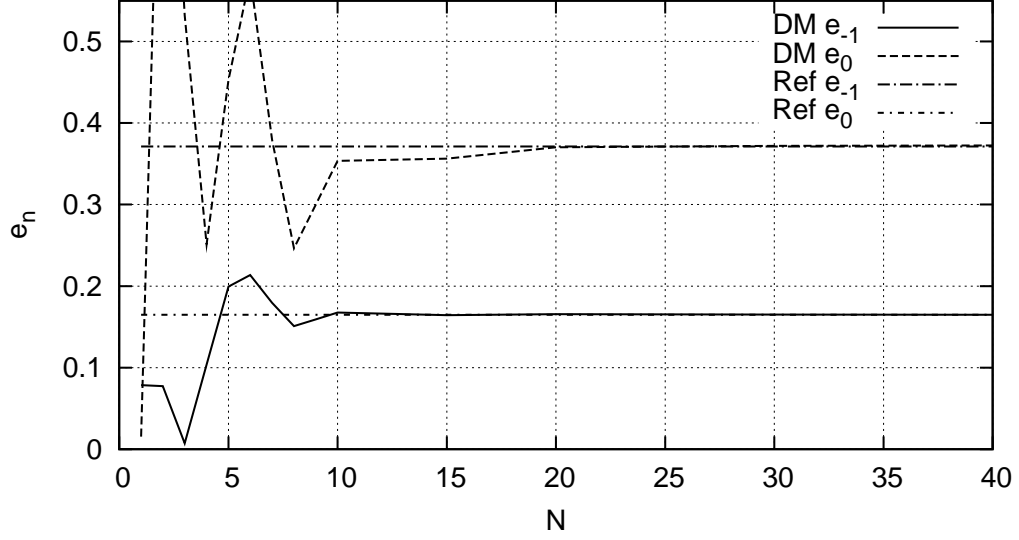
$$[\epsilon E_x] = [\epsilon][c^2 E_x + c s E_z] + \left[\left[\frac{1}{\epsilon}\right]\right]^{-1} [s^2 E_x - c s E_z].$$

Les fonctions  $c(x)$  et  $s(x)$  étant continues, on peut les développer en utilisant la factorisation de Laurent. L'équation précédente devient alors

$$[\epsilon E_x] = \left([\epsilon][c^2] + \left[\left[\frac{1}{\epsilon}\right]\right]^{-1} [s^2]\right) [E_x] + \left([\epsilon] - \left[\left[\frac{1}{\epsilon}\right]\right]^{-1}\right) [c s] [E_z].$$

Ce qui équivaut à

$$[k^2 E_x] = \left([k^2][c^2] + \left[\left[\frac{1}{k^2}\right]\right]^{-1} [s^2]\right) [E_x] + \left([k^2] - \left[\left[\frac{1}{k^2}\right]\right]^{-1}\right) [c s] [E_z]. \quad (2.14)$$



**Figure 2.7** Mêmes calculs que pour la figure 2.5 en utilisant les équations (2.23) tenant compte des règles de factorisation de Li. Les erreurs sur les efficacités,  $(e - e_{\text{ref}})$ , sont de l'ordre de 0,001 à partir de  $N = 20$ .

Si l'on pose,

$$Q_1 = \left( \llbracket k^2 \rrbracket - \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} \right) \llbracket c^2 \rrbracket \quad (2.15)$$

$$Q_2 = \left( \llbracket k^2 \rrbracket - \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} \right) \llbracket cs \rrbracket, \quad (2.16)$$

La relation (2.14) s'écrit, en tenant compte de l'égalité  $\llbracket c^2 \rrbracket + \llbracket s^2 \rrbracket = \text{Id}$ ,

$$\llbracket k^2 E_x \rrbracket = \left( Q_1 + \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} \right) \llbracket E_x \rrbracket + Q_2 \llbracket E_z \rrbracket. \quad (2.17)$$

De même, on peut exprimer  $E_z$  en fonction des composantes normale et tangentielle,

$$\epsilon E_z = \epsilon s E_T + \epsilon c E_N, \quad (2.18)$$

ce qui conduit, après transformation de Fourier, discrétisation et troncation, à

$$\llbracket k^2 E_z \rrbracket = \left( \llbracket k^2 \rrbracket - \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} \right) \llbracket cs \rrbracket \llbracket E_x \rrbracket + \left( \llbracket k^2 \rrbracket \llbracket s^2 \rrbracket + \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} \llbracket c^2 \rrbracket \right) \llbracket E_z \rrbracket.$$

Soit, en utilisant les matrices  $Q_1$  et  $Q_2$ ,

$$\llbracket k^2 E_z \rrbracket = Q_2 \llbracket E_x \rrbracket + (\llbracket k^2 \rrbracket - Q_1) \llbracket E_z \rrbracket. \quad (2.19)$$

De cette équation on peut déduire  $\llbracket E_z \rrbracket$  :

$$\llbracket E_z \rrbracket = (\llbracket k^2 \rrbracket - Q_1)^{-1} (\llbracket k^2 E_z \rrbracket - Q_2 \llbracket E_x \rrbracket), \quad (2.20)$$

soit, en tenant compte de l'égalité  $k^2 E_z = i\omega\mu \partial H_y / \partial z$  (1.7c),

$$[E_z] = ([k^2] - Q_1)^{-1} (i\omega\mu \left[ \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] - Q_2[E_x]),$$

qui, en tenant compte du fait que la dérivation par rapport à  $x$  devient une multiplication par  $i\sigma$  dans l'espace de Fourier, devient

$$[E_z] = -([k^2] - Q_1)^{-1} (\omega\mu\sigma[H_y] + Q_2[E_x]). \quad (2.21)$$

En combinant ce résultat avec l'équation (2.17),  $[k^2 E_x]$  devient

$$\begin{aligned} [k^2 E_x] &= \left( Q_1 + \left[ \frac{1}{k^2} \right]^{-1} - Q_2([k^2] - Q_1)^{-1} Q_2 \right) [E_x] \\ &\quad - \omega\mu Q_2([k^2] - Q_1)^{-1} \sigma[H_y]. \end{aligned} \quad (2.22)$$

En tenant compte de l'égalité  $[(1/k^2)\partial H_y / \partial x] = (1/i\omega\mu)[E_z]$  (1.7c), les équations (1.41) décrivant le champ en polarisation TM, deviennent

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial [E_x]}{\partial z} = i\sigma([k^2] - Q_1)^{-1} Q_2[E_x] \\ \quad + i\omega\mu \left( 1 + \sigma([k^2] - Q_1)^{-1} \sigma \right) [H_y] \\ \frac{\partial [H_y]}{\partial z} = \frac{-i}{\omega\mu} \left( Q_1 + \left[ \frac{1}{k^2} \right]^{-1} - Q_2([k^2] - Q_1)^{-1} Q_2 \right) [E_x] \\ \quad + iQ_2([k^2] - Q_1)^{-1} \sigma[H_y]. \end{array} \right. \quad (2.23a)$$

$$(2.23b)$$

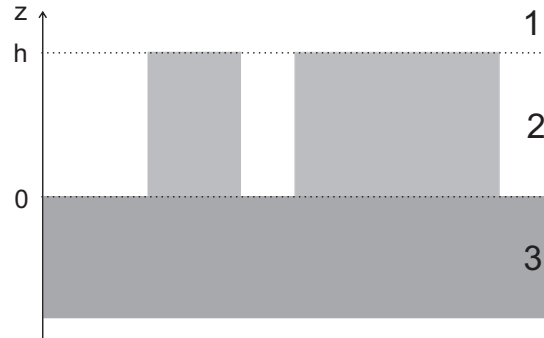
Dans ces équations, les inconnues sont les vecteurs  $[E_x]$  et  $[H_y]$  qui sont des fonctions de  $z$ . Les matrices  $[k^2]$ ,  $[1/k^2]^{-1}$ ,  $[c^2]$  et  $[cs]$  sont des fonctions de  $z$  connues dont la définition se fait à partir de la structure.

On vérifie (figure 2.7) que cette formulation règle le problème de la convergence très lente en fonction du nombre d'harmoniques et permet ainsi d'obtenir une très bonne précision, y compris dans le cas TM.

Cette formulation fait intervenir une complexité supplémentaire puisqu'il est nécessaire de définir un champ de vecteurs s'identifiant aux normales aux interfaces et variant continûment au passage des interfaces. La définition de ce champ est relativement simple dans le cas où il n'y a qu'une seule interface définie par une fonction  $z = f(x)$  continue, mais peut être plus compliquée dans d'autres cas : définition de l'interface par une fonction paramétrique, interfaces multiples, présence d'inclusions, etc.

En polarisation TE, le champ est régi par l'équation (1.18) qui fait intervenir le produit entre  $k^2(x)$  qui est discontinu au passage d'une interface et  $E_y(x)$  qui est continu. Puisque c'est la règle de Laurent qui doit être utilisée dans ce cas, les équations (1.25) sont déjà écrites avec les règles de factorisation correctes.





**Figure 2.8** Exemple de profil adapté au traitement par la méthode RCWA. Zone 1 : superstrat ; Zone 2 : zone modulée, invariante entre 0 et  $h$  ; Zone 3 : substrat.

### 2.3 Cas particulier d'une structure invariante selon $(Oz)$ (méthode RCWA)

Initialement, c'est principalement pour sa grande rapidité par rapport à la méthode différentielle que nous nous sommes intéressés à la méthode RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis), également appelée FMM (Fourier Modal Method) ou MMFE (Modal Method by Fourier Expansions). Par la suite, avec la nouvelle formulation de l'algorithme d'intégration de la méthode différentielle que nous proposons (cf. paragraphe 3), cet avantage de la méthode RCWA est devenu caduque. La méthode RCWA conserve néanmoins un intérêt car, comme ses équations sont plus simples, elle est plus facile à mettre en œuvre que la méthode différentielle. De plus, de nombreuses structures, en particulier celles obtenues par lithographie, correspondent assez bien à une hypothèse d'invariance selon  $(Oz)$ . La méthode RCWA, combinée à l'utilisation de l'algorithme des matrices  $S$  peut également être appliquée à des profils en marches d'escalier. Par contre son extension à des profils quelconques est en général non valable (cf. paragraphe 4.5).

L'origine de la méthode RCWA remonte au milieu des années 1970 [33] et fut popularisée par M. G. Moharam et T. K. Gaylord en 1981 [1]. Au milieu des années 1990 la méthode bénéficia des formulations stables d'algorithmes d'itérations (matrices  $R$  [34], matrices  $T$  améliorée [35, 36], matrices  $S$  [26]), puis des progrès sur la factorisation des séries de Fourier [27, 28, 3].

L'hypothèse d'invariance selon  $(Oz)$  implique des parois verticales et un vecteur normal horizontal quelle que soit la hauteur  $z$  à l'intérieur de la zone modulée. Pour un  $z$  donné on a donc  $c = 0$  et  $s = 1 \forall x$ , ce qui entraîne la

simplification des équations (2.23) en

$$\begin{cases} \frac{\partial[E_x]}{\partial z} = i\omega\mu(1 + \sigma\llbracket k^2 \rrbracket^{-1}\sigma)[H_y] \\ \frac{\partial[H_y]}{\partial z} = \frac{-i}{\omega\mu}\llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1}[E_x]. \end{cases} \quad (2.24a)$$

$$(2.24b)$$

Ces équations concernent le cas TM, les équations dans le cas TE étant toujours inchangées par rapport à (1.25).

En posant  $H'_y = \omega\mu H_y$  et en écrivant le système (2.24) sous forme matricielle, on obtient

$$\frac{\partial[F(z)]}{\partial z} = M[F(z)], \quad (2.25)$$

où le vecteur  $[F(z)]$  formé par la juxtaposition des vecteurs  $[E_x(z)]$  et  $[H'_y(z)]$ ,

$$[F(z)] = \begin{bmatrix} [E_x(z)] \\ [H'_y(z)] \end{bmatrix}$$

et où la matrice  $M$  est indépendante de  $z$  et est définie par

$$M = i \begin{pmatrix} 0 & \text{Id} + \sigma\llbracket k^2 \rrbracket^{-1}\sigma \\ -\llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} & 0 \end{pmatrix}.$$

La méthode de résolution consiste à effectuer un changement de base de façon à diagonaliser la matrice  $M$ . Dans cette nouvelle base, on a

$$\frac{\partial[F'(z)]}{\partial z} = \Lambda[F'(z)], \quad (2.26)$$

où  $\Lambda$  est une matrice diagonale composée des valeurs propres  $\lambda_i$  de  $M$  et  $[F'(z)] = Q^{-1}[F(z)]$ .  $Q$  est la matrice dont les colonnes sont les vecteurs propres de  $M$ , rangés dans le même ordre que les valeurs propres dans la matrice  $\Lambda$ .

Le système (2.26) étant découplé, on en déduit facilement la solution  $[F'(h)]$  à partir d'une condition initiale  $[F'(0)]$  :

$$[F'(h)] = \Phi[F'(0)],$$

où  $\Phi$  est la matrice diagonale dont les éléments valent

$$\Phi_{i,i} = \exp(\lambda_i h).$$

On en déduit la solution dans la base d'origine :

$$[F(h)] = Q\Phi Q^{-1}[F(0)].$$

On a donc  $P = Q\Phi Q^{-1}$  dont on peut déduire la matrice  $T$  (cf. chapitre 1, paragraphe 3.4).

### 3 Algorithme d'intégration matriciel

La faible vitesse de la méthode différentielle comparée à la méthode RCWA pouvait être considérée comme normale étant donnée que cette dernière est beaucoup moins précise lorsqu'elle est appliquée à des profils quelconques. En fait le problème de précision de la méthode RCWA dans le cas d'un profil arbitraire est lié au non respect des règles de factorisation de L.Li et pas au schéma d'intégration qu'elle utilise.

La méthode de tir est la méthode généralement utilisée pour résoudre numériquement un système d'équations différentielles couplées avec conditions aux limites. Cette méthode a été utilisée dans la méthode différentielle depuis son origine et c'est celle que nous avons utilisé initialement dans nos codes. L'inconvénient de la méthode de tir est de nécessiter d'intégrer le système autant de fois qu'il y a d'équations.

Nous proposons ici un nouveau schéma d'intégration pour la méthode différentielle beaucoup plus rapide que la méthode de tir et donnant les mêmes résultats.

Pour un nombre de pas d'intégration et un nombre d'harmoniques identiques, la méthode différentielle devient avec cette nouvelle formulation, environ 2 à 3 fois plus rapide que la méthode RCWA, tout en restant bien sûr, beaucoup plus précise dans le cas d'un profil non invariant selon (Oz).

#### 3.1 Principe de l'algorithme Runge et Kutta d'ordre 4 classique

L'algorithme permet d'intégrer une équation différentielle de la forme

$$\frac{dy(z)}{dz} = f(z, y(z)). \quad (2.27)$$

La fonction est évaluée de proche en proche, en partant d'un point où sa valeur est connue jusqu'à un autre où on souhaite la connaître. L'itération se fait à l'aide de la relation

$$y(z+h) = y(z) + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4, \quad (2.28)$$

avec

$$k_1 = hf(z, y(z)) \quad (2.29)$$

$$k_2 = hf\left(z + \frac{h}{2}, y(z) + \frac{k_1}{2}\right) \quad (2.30)$$

$$k_3 = hf\left(z + \frac{h}{2}, y(z) + \frac{k_2}{2}\right) \quad (2.31)$$

$$k_4 = hf(z+h, y(z) + k_3). \quad (2.32)$$

Le pas d'itération doit être choisi suffisamment fin pour que la fonction soit proche de son développement limité à l'ordre 4 sur l'intervalle du pas d'intégration.

### 3.2 Algorithme d'intégration matriciel basé sur Runge et Kutta

Dans le cas de la méthode différentielle le système est sous la forme

$$\frac{d[F(z)]}{dz} = M(z)[F(z)] \quad (2.33)$$

et on cherche à obtenir la matrice  $P(z)$  liant le champ à l'altitude  $(z + h)$  avec celui à l'altitude  $z$

$$[F(z + h)] = P(z)[F(z)]. \quad (2.34)$$

Supposons dans un premier temps que  $h$  est suffisamment faible pour que le vecteur  $[F(z + h)]$  puisse être obtenu à l'aide d'un seul pas d'intégration par la méthode Runge et Kutta d'ordre 4, à partir du vecteur  $[F(z)]$ . On peut alors écrire d'après (2.28-2.32)

$$P(z) = \text{Id} + \frac{h}{6}M_1(z) + \frac{h}{3}M_2(z) + \frac{h}{3}M_3(z) + \frac{h}{6}M_4(z) \quad (2.35)$$

avec

$$M_1(z) = M(z) \quad (2.36)$$

$$M_2(z) = M\left(z + \frac{h}{2}\right)\left(\text{Id} + \frac{1}{2}M_1(z)\right) \quad (2.37)$$

$$M_3(z) = M\left(z + \frac{h}{2}\right)\left(\text{Id} + \frac{1}{2}M_2(z)\right) \quad (2.38)$$

$$M_4(z) = M(z + h)\left(\text{Id} + M_3(z)\right). \quad (2.39)$$

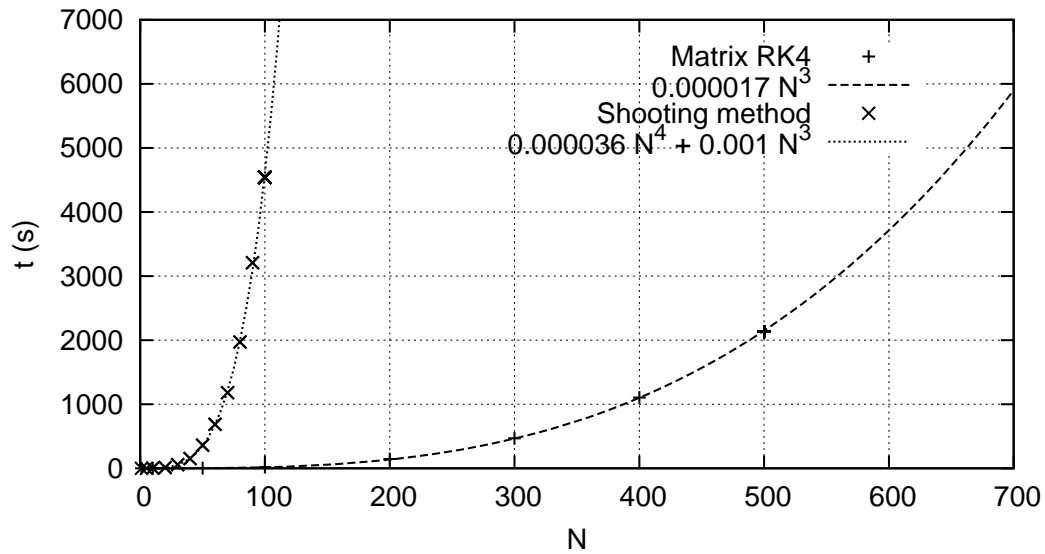
Dans le cas où  $h$  n'est pas suffisamment faible, il suffit de découper l'intervalle en couches suffisamment fines et de multiplier entre elles les matrices  $P_n(z)$  de chaque couche pour obtenir la matrice  $P(z)$  de l'intervalle complet.

On peut vérifier (Tab. 2.1) que les résultats obtenus par cette méthode et par la méthode de tir sont identiques.

La figure 2.9 présente les durées de calcul en fonction de  $N$ , avec la méthode d'intégration matricielle et avec la méthode de tir. On constate une nette supériorité de la méthode d'intégration matricielle en terme de vitesse. Par exemple, pour  $N = 100$  et 10 pas d'intégration, il faut plus de 4500 secondes pour faire le calcul avec la méthode de tir et à peine 20 secondes avec la méthode d'intégration matricielle (processeur Opteron à 1,8 GHz dans les deux

Ordre	Méth. tir	Form. matric.
-1	0,8785309971543	0,8785309971543
0	0,0022205495271	0,0022205495271

**Tableau 2.1** Comparaison des efficacités obtenues en utilisant la méthode de tir et la formulation matricielle (résultats identiques pour la précision d’affichage du programme). Cas d’un réseau métallique sinusoïdal avec  $\nu = 1,3 + i7,6$ ,  $L = 0,5\mu\text{m}$ ,  $h = 0,2\mu\text{m}$ ,  $\theta_i = 40^\circ$ ,  $\lambda = 632,8\text{ nm}$ ,  $N = 30$ ,  $N_S = 1000$  (1000 couches dans l’algorithme des matrices  $S$ ), polarisation TM.



**Figure 2.9** Comparaison de la durée des calculs en fonction de  $N$  entre la formulation matricielle et la méthode de tir (10 pas d’intégration sont utilisés pour les deux méthodes). La durée évolue comme un polynôme d’ordre 3 en  $N$  avec la méthode d’intégration matricielle et d’ordre 4 avec la méthode de tir.

cas). Cet écart s’explique par le fait que la méthode de tir nécessite autant d’intégrations qu’il y a d’équations dans le système, alors que la méthode d’intégration matricielle résout le problème en une seule intégration. Les durées de calcul sont très bien modélisées par un polynôme de degré 3, dans le cas de la méthode d’intégration matricielle et de degré 4, dans le cas de la méthode de tir.

### 3.3 Optimisation de l’algorithme

L’algorithme Runge et Kutta d’ordre 4 est l’un des plus utilisé en raison de sa simplicité et de sa performance. En suivant la même démarche, la plupart des méthodes d’intégration d’équations différentielles peuvent être transpo-

sées sous forme matricielle.

Par exemple, pour un système du premier ordre, W. H. Press et al. [22] conseillent l'utilisation d'un algorithme de type Burlish-Stoer ou d'un algorithme Runge et Kutta Dormand-Prince d'ordre 8 avec contrôle du pas adaptatif, tout en précisant que ces méthodes sont d'une efficacité considérablement supérieure à celle de la méthode Runge et Kutta d'ordre 4.

En basant la formulation matricielle sur une de ces méthodes, il est donc possible d'améliorer encore la rapidité du calcul pour une précision donnée. Toutefois, ces méthodes sont également plus complexes et donc plus difficiles à mettre en œuvre sous forme matricielle, que la classique méthode Runge et Kutta d'ordre 4.

## 4 Validation

Dans ce qui suit, nous présentons la validation du code décrit au chapitre 1 et incluant les améliorations présentées dans ce chapitre.

### 4.1 Conservation de l'énergie

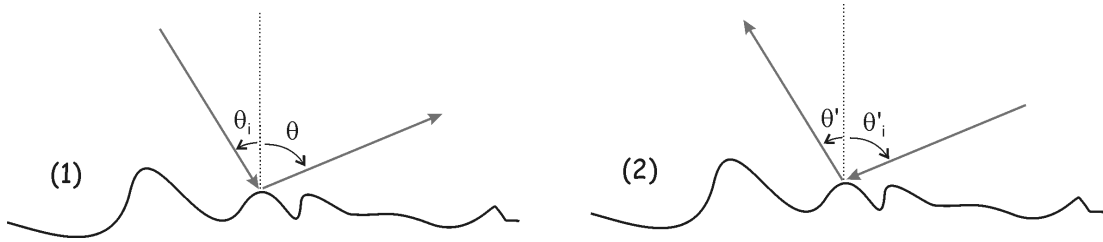
La première étape dans la validation du code est la vérification de la conservation de l'énergie. Dans le cas d'une structure sans pertes, la somme de l'énergie du champ diffracté en réflexion et en transmission doit être égale à celle du champ incident. Dans le cas d'une structure périodique ceci se traduit par une somme des efficacités égale à 1.

Nous avons vu au paragraphe 1 que, lorsque l'épaisseur n'est pas très faible devant  $\lambda$ , la conservation de l'énergie requiert l'emploi de l'algorithme des matrices  $S$ . En utilisant cet algorithme avec un découpage en tranches suffisamment fines, la conservation de l'énergie est assurée avec une très bonne précision, de l'ordre de  $10^{-14}$  à  $10^{-15}$  (Fig. 2.4).

### 4.2 Théorème de réciprocité

D'après le théorème de réciprocité [23] l'intensité d'un signal électromagnétique demeure inchangée par permutation de la source et du détecteur (Fig. 2.10).

Le tableau 4.2 illustre, dans le cas d'un réseau, la vérification du théorème de réciprocité par la méthode différentielle. Le réseau est d'abord éclairé avec un angle d'incidence de  $5^\circ$  et on mesure l'efficacité à  $30,6^\circ$ , puis on éclaire le réseau avec une incidence de  $-30,6^\circ$  et on mesure à  $-5^\circ$ . Les efficacités obtenues dans les deux cas sont identiques, ce qui est en accord avec le théorème de réciprocité.



**Figure 2.10** Théorème de réciprocité : l'intensité mesurée dans la direction  $\theta$  lorsque la structure est éclairée avec une incidence  $\theta_i$  est la même que l'intensité mesurée dans la direction  $\theta' = -\theta_i$  lorsque la structure est éclairée avec une incidence  $\theta'_i = -\theta$  (les angles d'incidence et de diffraction sont comptés avec des conventions de signe opposées).

$\theta_i = 5,00^\circ$			$\theta_i = -30,60^\circ$		
$n$	$\theta_n(^{\circ})$	$e_n$	$n$	$\theta_n(^{\circ})$	$e_n$
-2	-49,16	0,00024	-1	-68,57	0,00001
-1	-19,55	0,00006	0	-30,60	0,00035
0	5,00	0,00052	1	-5,00	<b>0,01144</b>
1	<b>30,60</b>	<b>0,01144</b>	2	19,55	0,02259
2	68,57	0,00726	3	49,16	0,00619

**Tableau 2.2** Vérification du théorème de réciprocité dans le cas d'un réseau échelette dont les faces font un angle de  $18,43^\circ$  avec le plan  $(0xy)$ . Le réseau utilisé a un indice de réfraction  $\nu = 1,5$ , une période  $L = 1500$  nm, une amplitude  $h = 500$  nm et est éclairé avec une longueur d'onde  $\lambda = 632,8$  nm, en polarisation TM.

### 4.3 Comparaison avec d'autres méthodes numériques

#### Structures diélectriques

Le tableau 2.3 présente les résultats obtenus par la méthode différentielle avec utilisation de l'algorithme des matrices  $S$  et prise en compte des règles de factorisation correctes en polarisation TM. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus par la méthode des sources fictives [29] dans le cas d'un réseau sinusoïdal diélectrique [32].

Les résultats obtenus par les deux méthodes sont en très bon accord, aussi bien en TE qu'en TM. On vérifie également que les résultats obtenus par les deux méthodes sont en très bon accord pour les efficacités en transmission (cf. Annexe B).

#### Structures métalliques

Le tableau 2.4 présente les résultats issus de la méthode différentielle, de la méthode des sources fictives et de la méthode intégrale [31] dans le cas d'un

TE			
Ordre	$e_{MFS}$	$e_{DM}$	$e_{MFS} - e_{DM}$
-5	0,000045869	0,000045852	0,000000017
-4	0,001134054	0,001134006	0,000000048
-3	0,008070529	0,008070730	0,000000201
-2	0,020801810	0,020802137	0,000000327
-1	0,012813080	0,012812680	0,000000400
0	0,002959393	0,002959457	0,000000064
+1	0,050775420	0,050775064	0,000000356
TM			
Ordre	$e_{MFS}$	$e_{DM}$	$e_{MFS} - e_{DM}$
-5	0,000047399	0,000047399	0,000000023
-4	0,001234323	0,001234333	0,000000032
-3	0,008229143	0,008229012	0,000000337
-2	0,018171580	0,018170750	0,000000112
-1	0,008579844	0,008578318	0,000000504
0	0,001315491	0,001316476	0,000000093
+1	0,008783302	0,008784462	0,000000105

**Tableau 2.3** Efficacités réfléchies par un réseau diélectrique sinusoïdal, calculées par la méthode des sources fictives (MFS) et la méthode différentielle classique (DM). On observe un très bon accord entre les résultats des deux méthodes, pour les deux polarisations TE et TM, aussi bien en réflexion qu'en transmission. Le réseau utilisé a un indice de réfraction  $\nu = \sqrt{3}$ , une période  $d = 3,9\lambda$ , une hauteur  $h = 0,5\lambda$ . L'angle d'incidence est  $\theta_i = 30^\circ$ . Les paramètres numériques utilisés pour la méthode différentielle sont :  $N = 100$ , nombre de couches de l'algorithme des matrices  $S$   $N_S = 100$ , pas d'intégration  $\Delta h = 0,00001\lambda$  (5000 pas).

réseau sinusoïdal en aluminium [32].

L'accord est bon entre les différentes méthodes, moins toutefois que dans le cas d'une structure diélectrique, en raison du plus grand nombre d'harmoniques nécessaire pour atteindre la convergence dans le cas d'une structure métallique.

#### 4.4 Influence des paramètres numériques

La méthode différentielle est une méthode numérique rigoureuse, dans le sens où aucune autre approximation que la discrétisation des fonctions continues et la troncation des fonctions s'étendant à l'infini, n'est faite. Bien sûr ces contraintes numériques ont une forte influence sur l'exactitude du résultat, le résultat "exact" ne pouvant être obtenu qu'avec un pas de discrétisation tendant vers 0 et une limite de troncation tendant vers l'infini, ce qui conduit éga-



TE						
Ordre	MFS	IM	DM	MFS – IM	DM – MFS	DM – IM
0	0,18016	0,18012	0,18019	0,00004	0,00002	0,00007
–1/1	0,31558	0,31559	0,31559	-0,00001	0,00000	0,00000
TM						
Ordre	MFS	IM	DM	MFS – IM	DM – MFS	DM – IM
0	0,37116	0,37111	0,37258	0,00005	0,00142	0,00147
–1/1	0,16491	0,16481	0,16493	0,00010	0,00003	0,00012

**Tableau 2.4** Efficacités réfléchies par un réseau sinusoïdal en aluminium, calculées par la méthode des sources fictives (MFS), la méthode intégrale (IM) et la méthode différentielle (DM). Calculs effectués pour un réseau d'indice de réfraction  $\nu = 1,3 + i7,1$ , de période  $d = 0,08333333\mu\text{m}$ , de hauteur  $h = 0,8\mu\text{m}$ , pour une longueur d'onde  $\lambda = 0,6\mu\text{m}$ . Paramètres numériques utilisés :  $N = 40$ ,  $N_S = 100$ .

lement à un temps de calcul et une capacité de mémoire tendant vers l'infini...<sup>5</sup> Les paramètres numériques sont au nombre de trois : le pas de discrétisation  $\Delta h$  de l'algorithme d'intégration des équations différentielles, le nombre  $N_S$  de couches dans l'algorithme des matrices  $S$  et le paramètre  $N$  de troncation du nombres d'harmoniques.

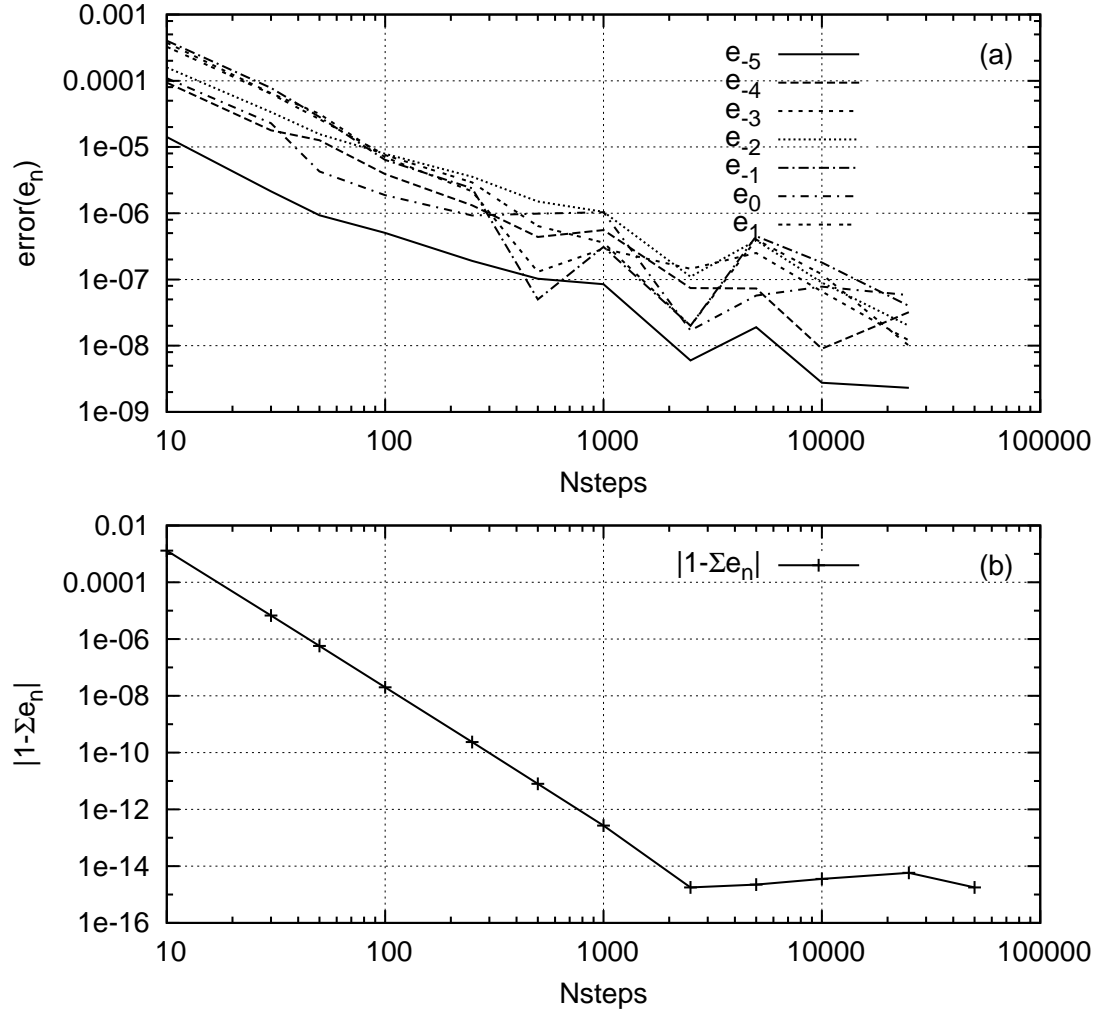
### Influence du pas d'itération de l'algorithme d'intégration numérique (paramètre $\Delta h$ )

La figure 2.11 illustre la convergence en fonction du nombre de pas d'intégration dans le cas d'un réseau diélectrique.

L'erreur sur l'efficacité  $e_n$  est calculée comme la différence entre l'efficacité obtenue avec le pas  $\Delta h$  et celle obtenue avec un pas tendant vers 0 (soit ici, en pratique  $\Delta h = \lambda / 10000$ ). L'erreur sur la conservation de l'énergie est calculée comme la différence entre la somme des efficacités et 1.

Comme on peut s'y attendre, on observe une décroissance globale de l'erreur avec le nombre de pas d'intégration. Pour 10 pas, soit  $\Delta h = \lambda / 20$ , les erreurs sur les efficacités réfléchies sont toutes inférieures à  $10^{-3}$ , elles sont inférieures à  $10^{-5}$  pour 100 pas, soit  $\Delta h = \lambda / 200$  et inférieures à  $10^{-6}$  pour  $\Delta h = \lambda / 2000$ . L'erreur sur la conservation de l'énergie décroît plus rapidement que celles sur les efficacités, jusqu'à atteindre une valeur de  $10^{-14}$ ,  $10^{-15}$ .

<sup>5</sup>Même si on suppose que l'on a aucune limitation concernant la durée du calcul, on sera toujours limité par la précision finie du calculateur. La diminution du pas d'itération et l'augmentation du nombre d'harmoniques entraînent une augmentation du nombre d'itérations et donc du phénomène d'accumulation des erreurs. En pratique, pour les valeurs usuelles du pas d'itération et du nombre d'harmoniques, et en utilisant une précision sur 64 bits, ce phénomène est négligeable et nous n'en tiendrons pas compte.



**Figure 2.11** Erreurs sur les efficacités en réflexion (a) et sur la conservation de l'énergie (b) en fonction du nombre de pas d'itérations de l'algorithme d'intégration des équations différentielles. Les calculs sont effectués pour un réseau sinusoïdal d'indice  $\nu = 1,73$ , de période  $d = 3,9\lambda$ , de hauteur  $h = 0,5\lambda$ , éclairé en polarisation TE avec une incidence  $i = 30^\circ$ . Le nombre de couches pour l'algorithme des matrices  $S$  est  $N_S = 10$  et le paramètre de troncation des harmoniques  $N = 25$ . L'algorithme d'intégration est un algorithme Runge et Kutta d'ordre 4.

La durée du calcul est proportionnelle au nombre de pas d'intégration. Le choix de la valeur du pas résulte donc d'un compromis entre vitesse et précision. En pratique, on n'effectue pas une étude de convergence en fonction de  $\Delta h$  à chaque calcul, en raison du temps que cela nécessiterait. Par contre,  $\Delta h$  ayant une influence sur la conservation de l'énergie, on peut utiliser cette dernière comme un indicateur de la convergence, en prenant garde toutefois au fait que la précision sur les efficacités converge plus lentement que celle sur la conservation de l'énergie.

### **Influence du nombre de tranches de l'algorithme des matrices $S$ (paramètre $N_S$ )**

La figure 2.12 illustre la convergence des efficacités réfléchies et du bilan d'énergie, en fonction du paramètre  $N_S$ , pour un réseau de hauteur  $5\lambda$ , d'indice de réfraction 1,5 et identique au réseau du paragraphe 4.4 par ailleurs. On constate une convergence très rapide. Les erreurs sur les efficacités se stabilisent à des valeurs inférieures à  $10^{-8}$  à partir de  $N_S = 10$  ce qui correspond à des tranches d'épaisseur  $\lambda/2$ . L'erreur sur la conservation d'énergie chute sous  $10^{-14}$  à partir de  $\lambda/4$ .

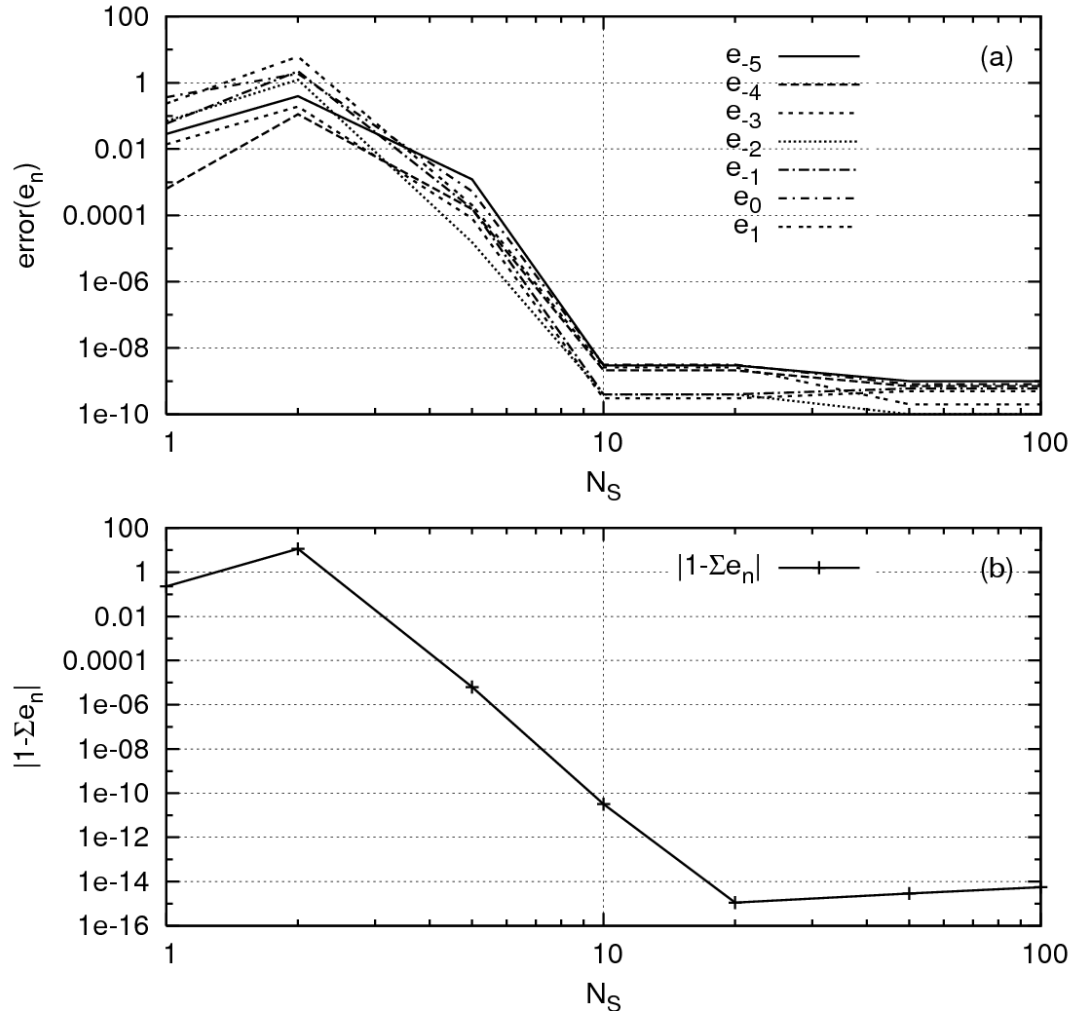
En pratique une valeur de  $N_S$  telle que l'épaisseur d'une tranche soit inférieure ou de l'ordre de  $\lambda/10$  est bien adaptée aux calculs sur des structures diélectriques. Pour des structures métalliques, il est préférable de prendre des valeurs de l'épaisseur de tranche inférieures ou de l'ordre de  $\lambda/100$  en raison des plus fortes valeurs de l'indice de réfraction et du plus grand nombre d'harmoniques nécessaires (se référer au paragraphe 1.1 pour plus de précision sur le lien entre ces grandeurs et le problème de l'instabilité numérique).

### **Influence du nombre d'harmoniques utilisées dans le calcul (paramètre $N$ )**

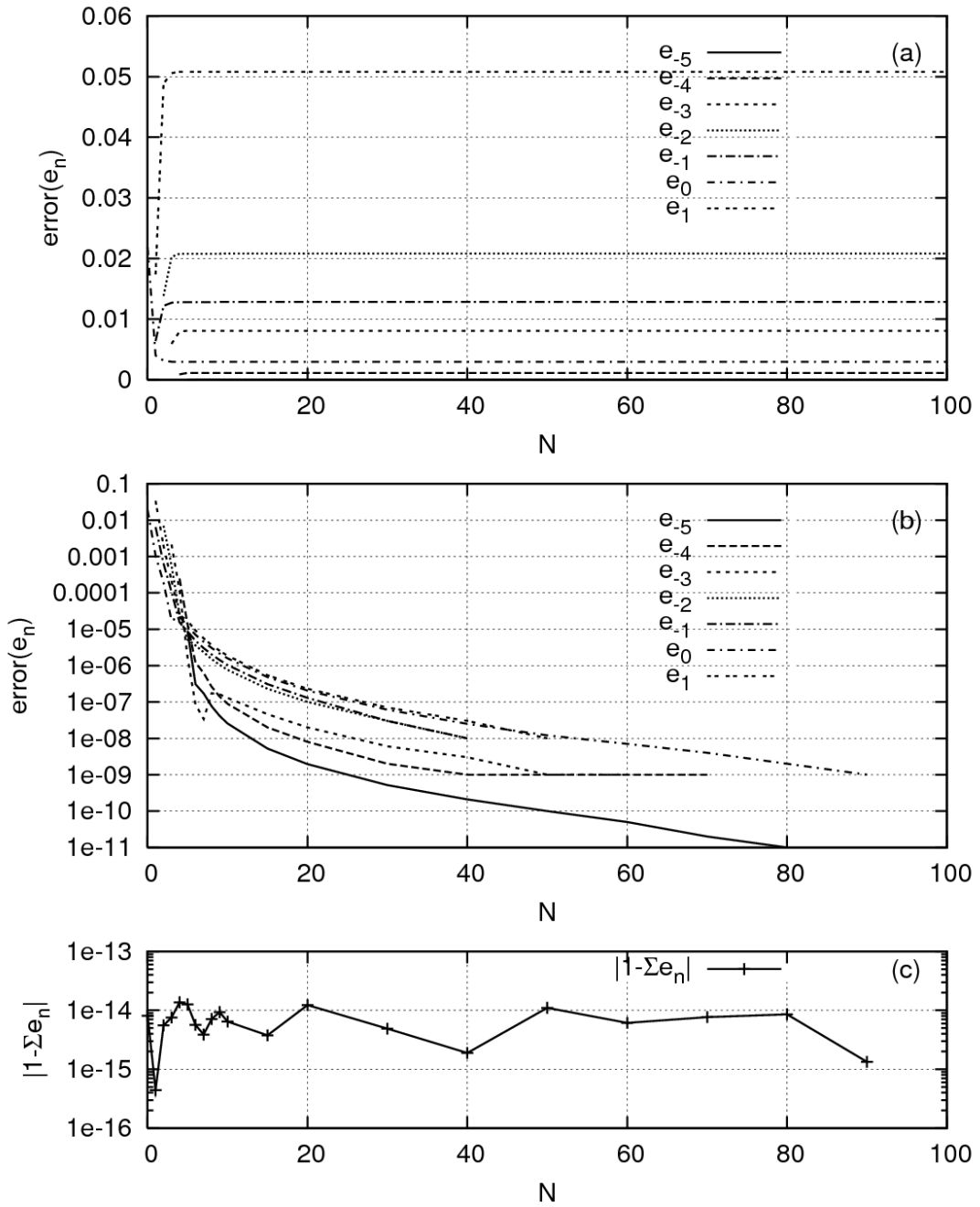
Le nombre d'harmoniques retenues est un paramètre important au niveau de la convergence, en particulier parce qu'il a une forte influence sur la durée du calcul, approximativement proportionnelle à  $N^3$  dans le cas de la méthode différentielle classique.

**Structures diélectriques** Pour le réseau diélectrique et les conditions d'éclairement décrits dans [32], on observe une très bonne convergence en polarisation TE (Fig. 2.13), et en polarisation TM (Fig. 2.14). Dans les deux cas, les erreurs sont inférieures à  $10^{-5}$  à partir du moment où  $N$  est suffisant pour décrire l'ensemble des modes propagatifs ( $N \geq 8$ ).

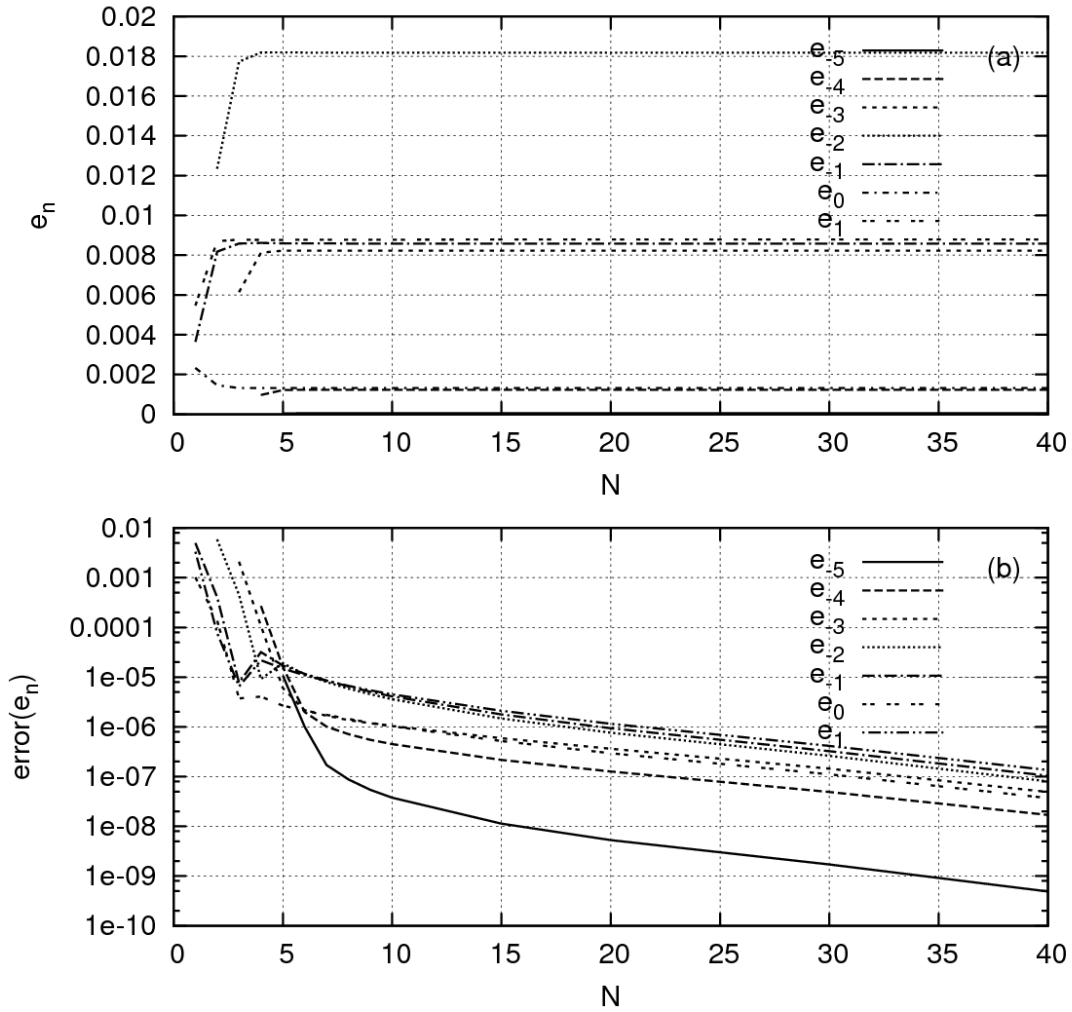
On note que la conservation de l'énergie totale est insensible au paramètre  $N$  (Fig. 2.13(c)). En conséquence, contrairement au cas des paramètres  $\Delta h$  et  $N_S$ , on ne peut pas utiliser ce critère comme indicateur de la bonne convergence vis à vis de  $N$ .



**Figure 2.12** Erreurs sur les efficacités en réflexion (a) et sur la conservation de l'énergie (b) en fonction du nombre  $N_S$  d'étapes dans l'algorithme des matrices  $S$ . Les calculs sont effectués pour un réseau sinusoïdal d'indice  $\nu = 1,5$ , de hauteur  $h = 5\lambda$ , de période  $d = 3,9\lambda$ , éclairé en polarisation TE avec une incidence  $i = 30^\circ$ . Le paramètre de troncation des harmoniques est  $N = 25$  et le pas d'intégration  $\Delta h = 0,00001\lambda$ .



**Figure 2.13** Convergence des efficacités en réflexion en fonction de  $N$ , en polarisation TE, pour le même réseau et les mêmes conditions d'éclairement que pour la figure 2.11, pour un pas d'intégration  $\Delta h = 0,00001\lambda$  et un nombre  $N_S = 100$  d'étapes dans l'algorithme des matrices  $S$ . (a) Efficacités en réflexion de l'ensemble des ordres propagatifs. (b) Erreurs sur les efficacités calculées comme  $\text{error}(e_n) = |e_n(N) - e_n(100)|$ . (c) Erreur sur la conservation de l'énergie.

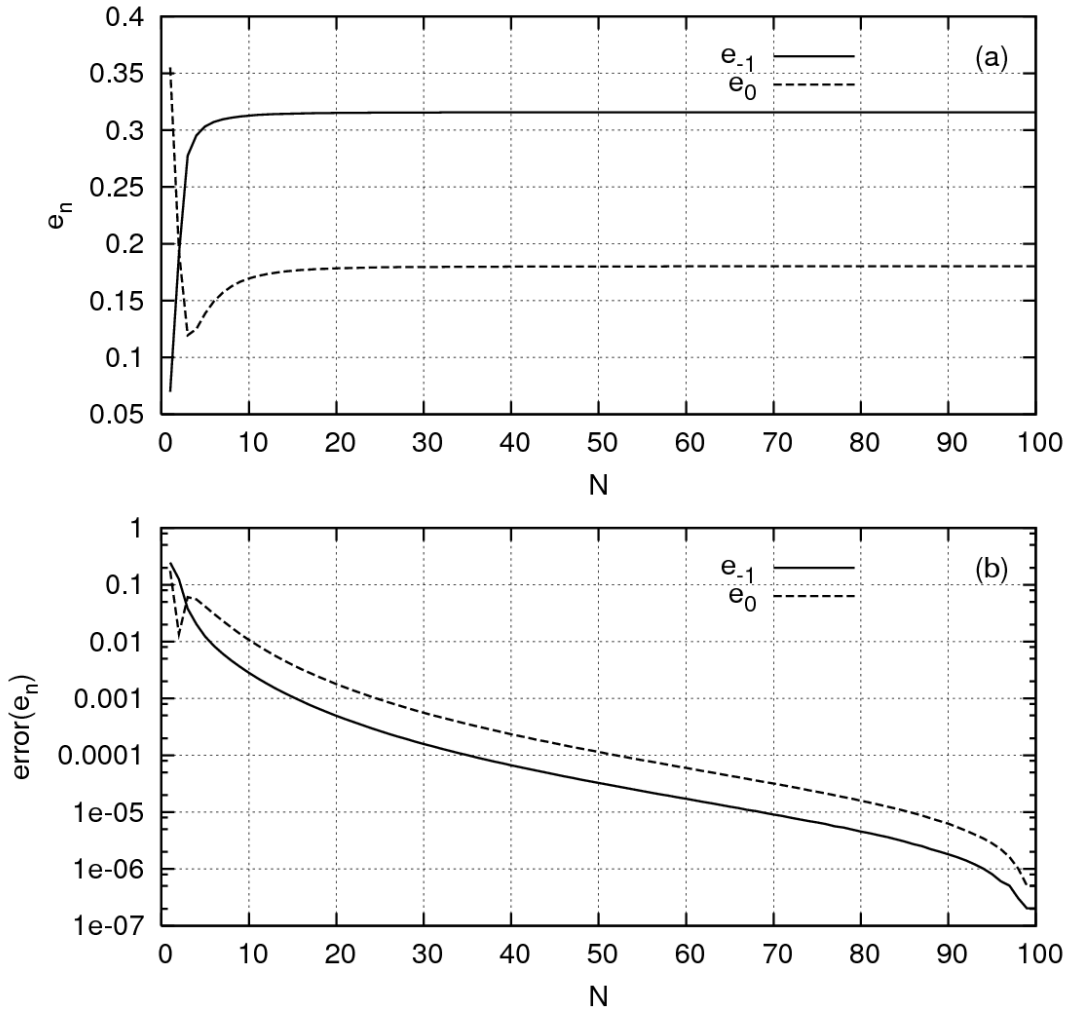


**Figure 2.14** Mêmes calculs que pour la figure 2.13, en polarisation TM.

**Structures métalliques** Dans le cas d'une structure métallique, la convergence des efficacités est représentée figure 2.15 pour la polarisation TE et figure 2.7 pour la polarisation TM, dans le cas du réseau métallique et des conditions d'éclairement décrits dans [32].

Les erreurs sur les efficacités sont de l'ordre de  $10^{-3}$  à partir de  $N = 20$  pour les polarisations TE et TM.

On peut noter que la convergence est moins rapide que pour une structure diélectrique, en raison du rôle plus important joué par les ondes évanescentes dans le cas d'une structure métallique.

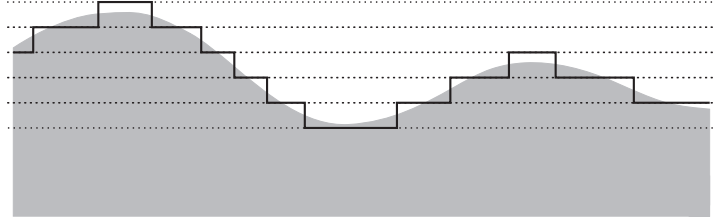


**Figure 2.15** Convergence des efficacités en réflexion, en polarisation TE, pour le réseau métallique et les conditions d'éclairement décrits figure 2.5.

#### 4.5 Cas de la méthode RCWA appliquée à des profils arbitraires

Les équations (2.24) de la méthode RCWA ont été établies à partir de l'hypothèse d'une invariance du profil selon ( $Oz$ ). Cependant, en utilisant l'algorithme des matrices  $S$  (ou un autre algorithme du même type), il est possible de combiner plusieurs couches invariantes entre leurs deux extrémités, afin d'obtenir un profil en forme de marches d'escalier.

On peut supposer que cette possibilité permet par extension de traiter un profil de forme quelconque à l'aide d'une approximation par un profil en forme de marches d'escalier (cf Fig 2.16), à condition que le pas de discrétisation soit suffisamment fin.

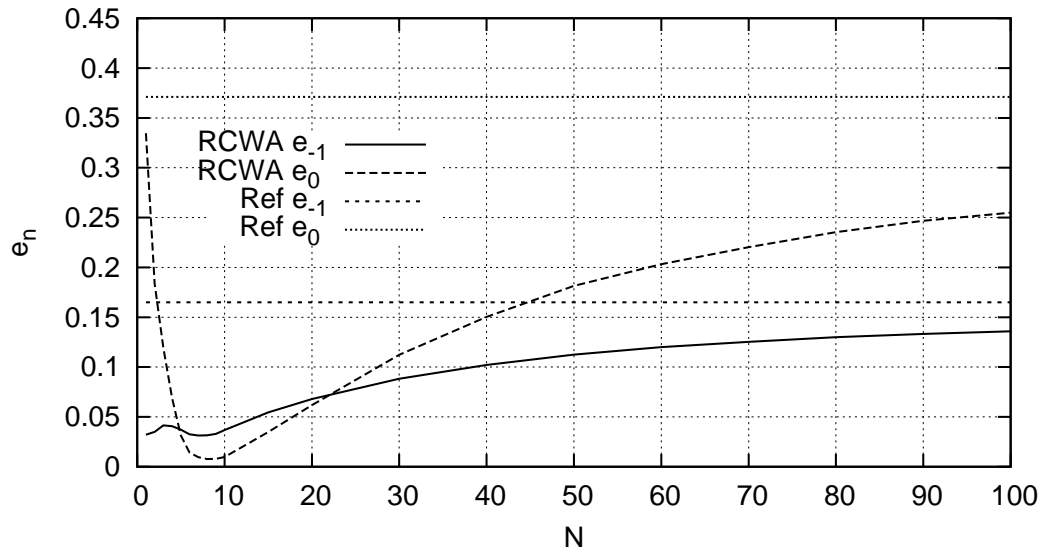


**Figure 2.16** Approximation d'un profil quelconque par un profil en marches d'escalier afin de permettre son traitement par la méthode RCWA combinée à l'algorithme des matrices  $S$ .

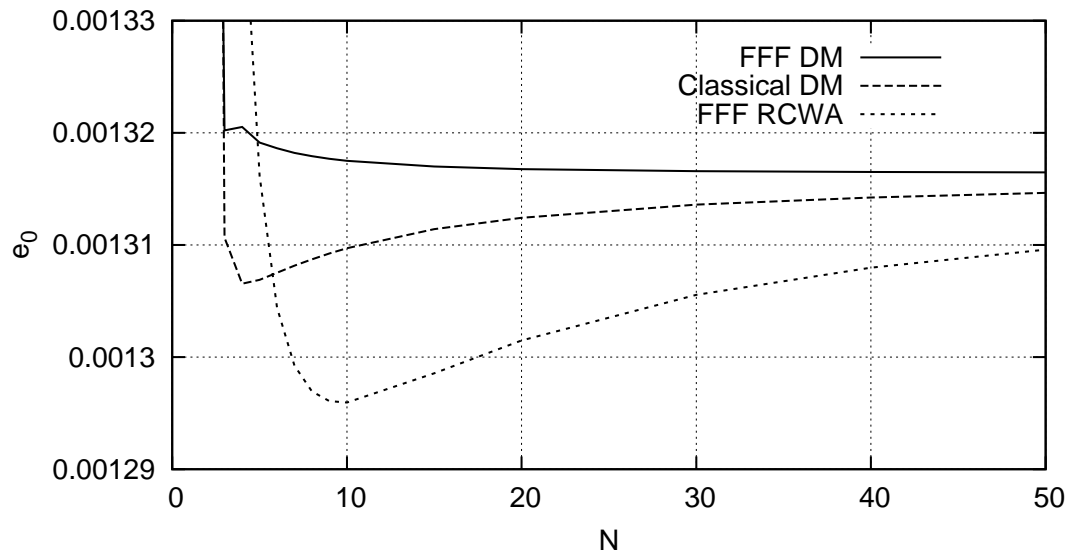
N	Meth. diff.	RCWA
0	0,757659	0,757636
1	0,354961	0,354965
2	0,193750	0,193689
3	0,119456	0,119428
4	0,124960	0,124952
5	0,138630	0,138630
6	0,149288	0,149290
7	0,157031	0,157036
8	0,162566	0,162571
9	0,166554	0,166561
10	0,169470	0,169477
15	0,176269	0,176277
20	0,178373	0,178380
30	0,179599	0,179607
40	0,179924	0,179932
50	0,180044	0,180052

**Tableau 2.5** Convergence de l'efficacité  $e(0)$  en fonction de  $N$  dans le cas d'un réseau métallique sinusoïdal pour une polarisation TE. Comparaison entre les résultats obtenus par la méthode différentielle et ceux obtenus par la méthode RCWA. Le profil utilisé pour la méthode RCWA est le profil en marche d'escaliers obtenu à partir du profil sinusoïdal avec 1000 pas de discrétisation. Les deux séries de résultats convergent de façon parallèle, avec un faible écart inférieur à  $10^{-5}$ . Les paramètres du réseau et les conditions d'éclairement sont les mêmes que ceux de la figure 2.5.





**Figure 2.17** Convergence des efficacités  $e(-1)$  et  $e(0)$  en fonction de  $N$  avec la méthode RCWA, pour une polarisation TM et des conditions identiques à celles du tableau 2.5 par ailleurs. Valeurs de référence issues de [32].



**Figure 2.18** Convergence de l'efficacité  $e(0)$  en fonction de  $N$  dans le cas du réseau diélectrique sinusoïdal décrit figure 2.11, pour une polarisation TM. Comparaison entre la méthode différentielle avec et sans prise en compte des règles de factorisation (FFF) et la méthode RCWA (avec prise en compte des règles de factorisation).

Le tableau 2.5 et la figure 2.17 montrent la convergence des efficacités en fonction de  $N$ , obtenues par la méthode RCWA, dans le cas du réseau sinusoïdal métallique décrit au paragraphe précédent. Dans le cas d'une polarisation TE, la convergence est satisfaisante, les résultats étant quasi égaux à ceux obtenus par la méthode différentielle (Tab. 2.5). Dans le cas TM (Fig. 2.17) les résultats semblent converger vers la bonne valeur, mais cette convergence est extrêmement lente : pour  $N = 100$  l'écart avec la valeur de référence est d'environ 30%.

Pour une structure diélectrique, en reprenant le cas du réseau diélectrique décrit au paragraphe précédent : en polarisation TE, les résultats sont très proches de ceux obtenus par la méthode différentielle, à condition que le pas de discrétisation du profil soit suffisamment fin. En polarisation TM (Fig. 2.18) les résultats convergent vers la bonne valeur mais beaucoup plus lentement qu'avec la méthode différentielle. Ceci étant, comme la convergence est globalement beaucoup plus rapide que dans le cas métallique, l'écart par rapport à la valeur de référence est seulement de 0,5% pour  $N = 50$  (cette précision est atteinte dès  $N = 3$  avec la méthode différentielle).

En résumé, en polarisation TE, que ce soit dans le cas d'une structure diélectrique ou métallique, les résultats obtenus par la méthode RCWA sont proches de ceux obtenus par la méthode différentielle, à condition que le profil soit discrétisé avec un pas suffisamment fin. Par contre, en polarisation TM, la convergence en fonction de  $N$  est beaucoup plus lente qu'avec la méthode différentielle. Si dans le cas diélectrique il reste possible de s'approcher de la valeur correcte avec une bonne précision (erreur relative inférieure à 1%) en prenant une valeur élevée du paramètre  $N$ , ce n'est plus possible dans le cas métallique ou en raison d'une convergence trop lente, même une approximation grossière de la valeur correcte ne peut être obtenue avec les valeurs de  $N$  qu'il est possible d'atteindre en un temps raisonnable.

Ces résultats peuvent s'expliquer au regard des équations utilisées dans chacune de ces méthodes :

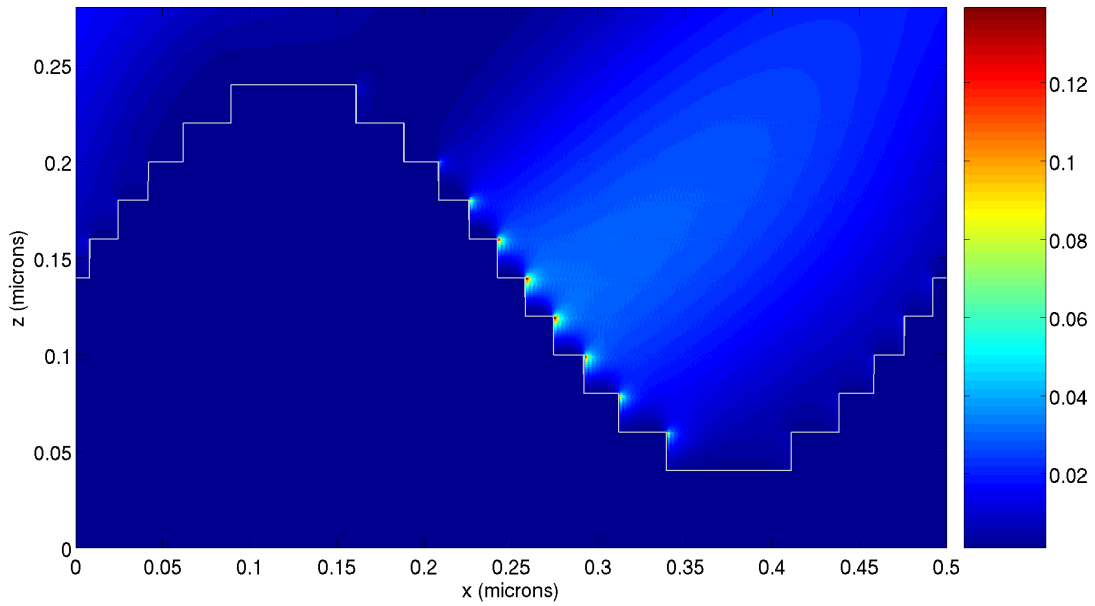
En polarisation TE, les équations intégrées par la méthode différentielle et par la méthode RCWA sont identiques. La différence entre les deux méthodes se situe au niveau de l'algorithme d'intégration. La méthode RCWA utilise un algorithme d'intégration qui considère les coefficients du système constants par morceaux. Ceci constitue un algorithme valable, bien que d'ordre peu élevé donc nécessitant un pas plus fin pour converger vers des valeurs aussi précises que celles obtenues par les algorithmes classiques tels Runge et Kutta.

En polarisation TM, les équations utilisées par la méthode différentielle (2.23) et par la méthode RCWA (2.24) sont différentes en raison de la prise en compte de la normale nécessaire au respect des règles de factorisation des séries de Fourier. Quand on modélise un profil quelconque par un profil en

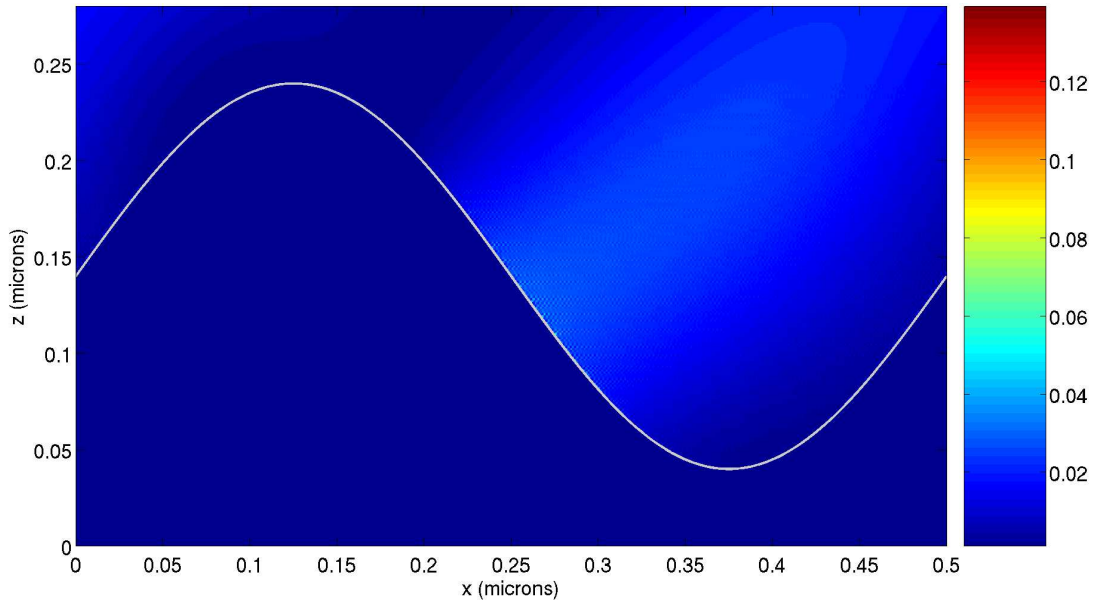
marches d'escalier, la normale à la surface ne tend pas vers la normale réelle, même quand le pas de discrétisation tend vers 0. Cela signifie que les règles de factorisation des séries de Fourier ne sont pas respectées et explique la mauvaise convergence de la méthode RCWA pour la polarisation TM.

En revanche, si la structure possède réellement une forme en marches d'escalier, les règles de factorisation sont bien respectées par la méthode RCWA et on peut se demander pourquoi la convergence est si lente (Fig. 2.17 et 2.18). Dans le cas des figures 2.17 et 2.18, le pas de discrétisation est inférieur à  $\lambda/3000$  et on pourrait s'attendre à ce que les deux structures donnent des résultats très similaires. En 2002, E. Popov et al. [2] ont montré, par l'étude du champ proche, que la lente convergence dans le cas des structures en marches d'escalier pouvait être attribuée à la présence d'intenses pics de champ électrique, localisés autour des arrêtes du profil (Fig. 2.19 et 2.21). Ces pics étant très localisés, ils requièrent un nombre élevé d'harmoniques pour être correctement modélisés, ce qui explique la lente convergence vis à vis de  $N$ . Ces pics de champ sont présents aussi bien dans le cas de structure diélectriques (Fig. 2.21) que métalliques (Fig. 2.21) et plus intenses dans ce dernier cas.

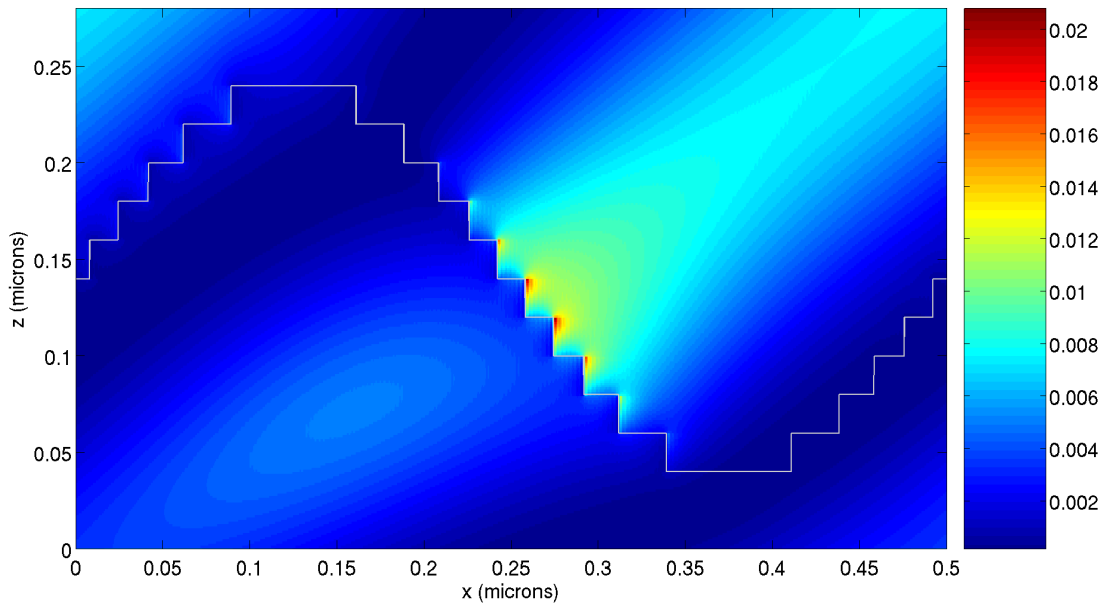
Bien que localement le champ soit très différent dans le cas d'une structure au profil en marches d'escalier (Fig. 2.19 et 2.21) et dans celui d'une structure au profil continu (Fig. 2.20 et 2.22), on constate que dès que l'on s'éloigne de l'interface le champ est peu modifié par le découpage ou non en marches d'escaliers (Fig. 2.23 et 2.24), ce qui est en accord avec le fait que les résultats en champ lointain (Fig. 2.17 et 2.18 par exemple) convergent vers des valeurs voisines lorsque le nombre d'harmoniques a une valeur suffisamment grande.



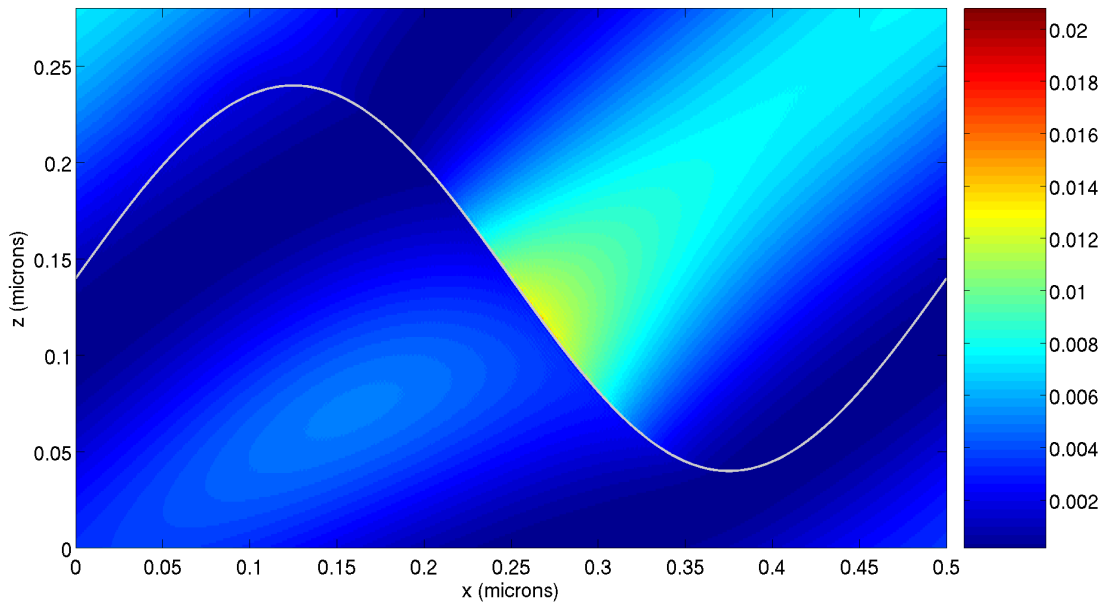
**Figure 2.19** Carte du champ  $E_x^2$  dans le cas d'un réseau en aluminium, pour une polarisation TM. La forme du réseau est l'approximation d'un profil sinusoïdal avec 10 tranches. On note une augmentation, très localisée, du champ autour des pointes, un effet qui a été étudié en détails par E. Popov et al. [2]. Le réseau a une hauteur  $h = 0,2 \mu\text{m}$ , une période  $d = 0,5 \mu\text{m}$ , un indice de réfraction  $\nu = 1,3 + i7,6$ , la longueur d'onde est  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ , l'angle d'incidence  $\theta_i = 40^\circ$  et le paramètre de troncation  $N = 200$ .



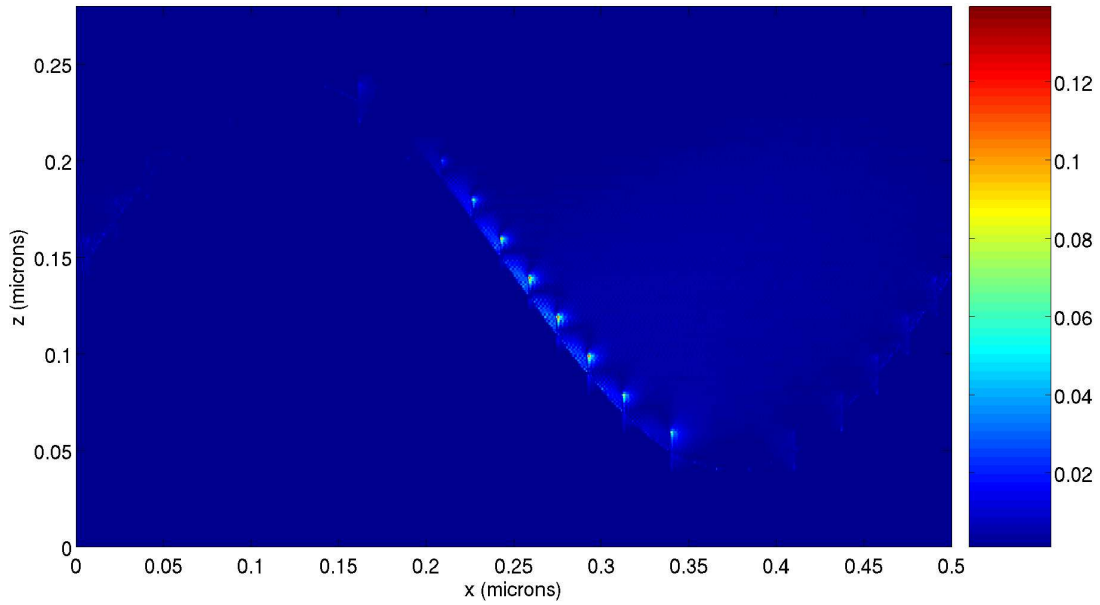
**Figure 2.20** Même chose que pour la figure 2.19 mais pour un réseau sinusoïdal non discrétisé.



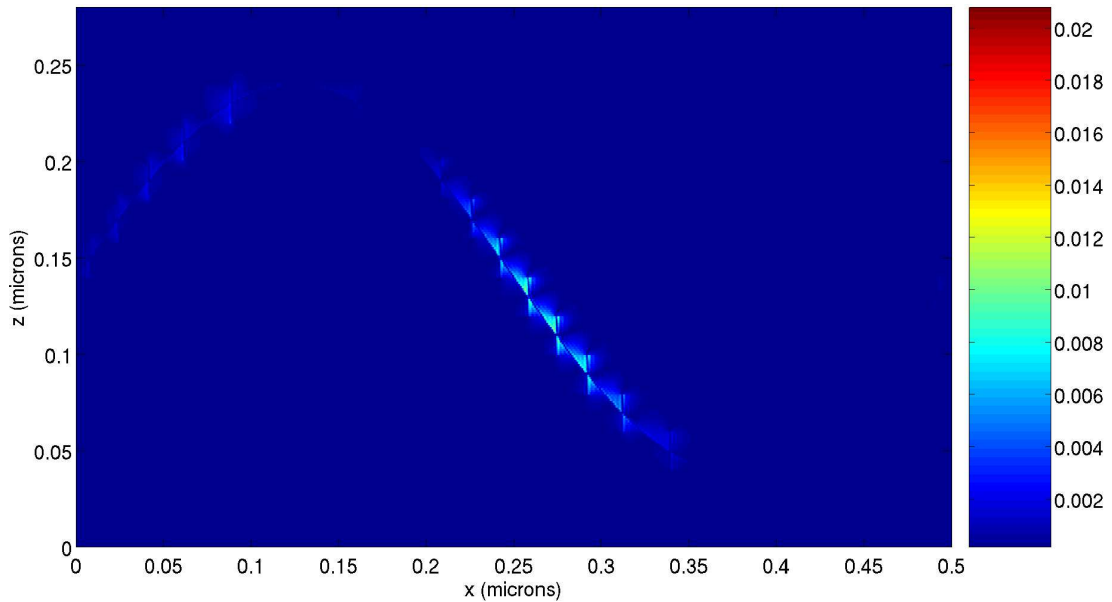
**Figure 2.21** Même chose que pour la figure 2.19 mais pour un réseau diélectrique, d'indice de réfraction  $\nu = 1,5$ .



**Figure 2.22** Même chose que pour la figure 2.21, pour un réseau sinusoïdal.



**Figure 2.23** Différence entre les valeurs de  $E_x^2$  calculées avec discrétisation du profil (Fig. 2.19) et sans discrétisation du profil (Fig. 2.20), dans le cas métallique. En dehors d'une zone localisée autour de l'interface la différence entre les deux cas est quasi nulle. (Même échelle que pour les figures 2.20 et 2.22).



**Figure 2.24** Même chose que Fig. 2.23 dans le cas diélectrique.



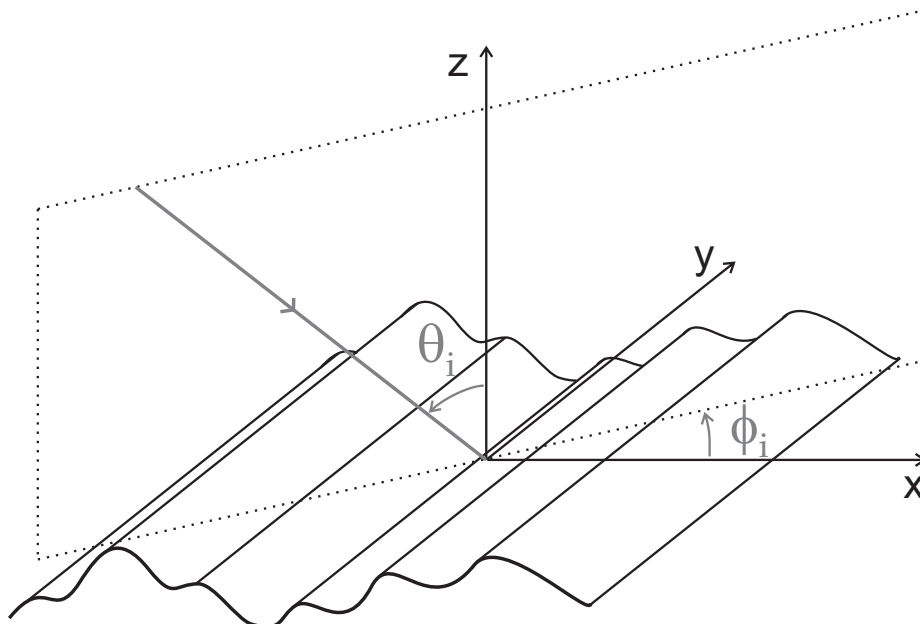
## Chapitre 3

### Méthode différentielle conique

Dans le chapitre 1 nous avons considéré une structure invariante selon une dimension et un plan d'incidence perpendiculaire à cette direction d'invariance. Nous considérons maintenant le cas où le plan d'incidence présente une orientation quelconque.

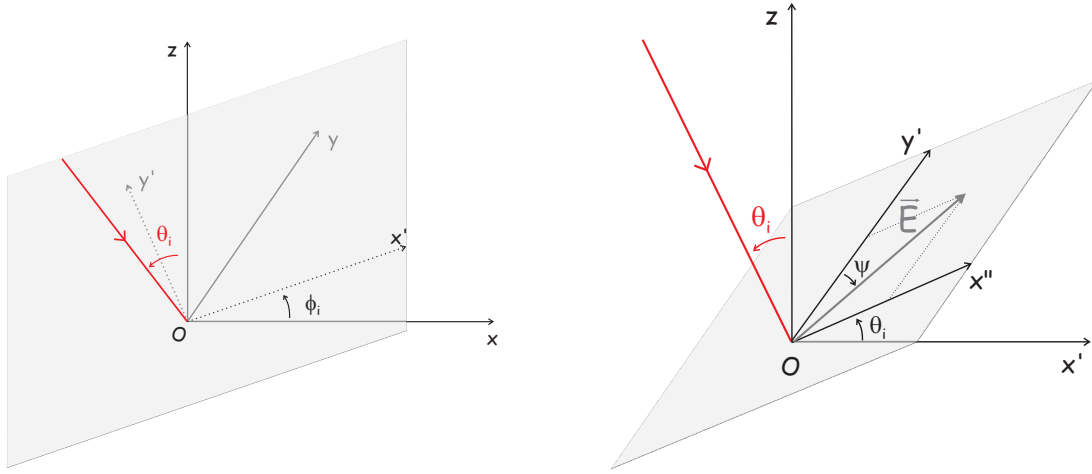
Dans cette configuration les ordres de diffraction se situent sur un cône d'axe ( $Oy$ ) et de demi angle au sommet, l'angle entre la direction d'incidence et la direction ( $Oy$ ), d'où le nom de diffraction conique.

Le cas conique (Fig. 3.1) permet certaines applications intéressantes par rapport au cas classique. Par exemple, dans le cas d'une structure périodique



**Figure 3.1** Définition du repère en incidence conique.





(a) Définition du repère  $(Ox'y'z)$ , lié au plan d'incidence, par rapport au repère  $(Oxyz)$  lié à la structure.

(b) Définition du plan  $(Ox''y')$  contenant le champ incident, par rapport au repère  $(Ox'y'z)$  lié au plan d'incidence.

Figure 3.2

non symétrique par rapport au plan  $(Oyz)$ , il permet de lever l'indétermination sur le sens de la dissymétrie avec la seule mesure de l'ordre 0 [37], ce qui autorise une reconstruction plus complète dans les applications de reconstruction utilisées dans l'industrie de la microélectronique.

Avec le cas conique, la structure demeure invariante selon une dimension, mais les directions de propagation prennent des valeurs dans les trois dimensions de l'espace. Ceci entraîne un accroissement important de la complexité par rapport au cas classique et constitue une étape supplémentaire en direction du traitement d'une structure tridimensionnelle.

## 1 Définition du problème

Comme pour le cas classique on se limite aux milieux isotropes, linéaires et non magnétiques ( $\mu = \mu_0$ ).

On définit un repère orthonormé  $(Oxyz)$  (Fig. 3.2a) lié à la structure et tel que la direction d'invariance soit selon  $(Oy)$ . L'angle entre le plan d'incidence et l'axe  $(Ox)$  est noté  $\phi_i$ , et on définit un repère  $(Ox'y'z)$  obtenu à partir de  $(Oxyz)$  par rotation d'un angle  $\phi_i$  autour de l'axe  $(Oz)$ . Le plan d'incidence correspond au plan  $(Ox'z)$ . On définit un troisième repère  $(Ox''y'z')$  (Fig. 3.2b) tel que le vecteur unitaire  $e'_z$  pointe vers la direction d'incidence. Les champs incidents  $E_i$  et  $H_i$  sont compris dans le plan  $(Ox''y')$ . On appelle  $\psi$  l'angle que fait le vecteur  $E_i$  avec la normale  $e_{y'}$  au plan d'incidence.

### 1.1 Dépendance en $y$ du champ

D'une façon générale, tant que l'on reste en optique linéaire, la structure diffractante peut être considérée [23, 24, 25] comme un opérateur linéaire  $\mathcal{R}$  transformant le champ incident  $\mathbf{u}_i$  ( $\mathbf{u} \equiv \mathbf{E}$  ou  $\mathbf{H}$ ) en champ total  $\mathbf{u}$  (cf. chap. 1-3.3),

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \mathcal{R}(\mathbf{u}_i(x, y, z)).$$

$\mathbf{u}_i(x, y, z)$  représentant l'onde plane incidente, sa dépendance en  $y$  s'écrit

$$\mathbf{u}_i(x, y, z) = \mathbf{u}_i(x, 0, z)e^{i\sigma_{y,0}y},$$

avec  $\sigma_{y,0} = k_1 \sin(\theta_i) \sin(\phi_i)$ .

Comme la structure est invariante selon  $y$ , l'opérateur  $\mathcal{R}$  l'est également. On a donc

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \mathcal{R}(e^{i\sigma_{y,0}y} \mathbf{u}_i(x, 0, z)) = e^{i\sigma_{y,0}y} \mathcal{R}(\mathbf{u}_i(x, 0, z))$$

et

$$\mathcal{R}(\mathbf{u}_i(x, 0, z)) = \mathbf{u}(x, 0, z).$$

Le champ total s'écrit donc sous la forme

$$\mathbf{u}(x, y, z) = e^{i\sigma_{y,0}y} \mathbf{u}(x, 0, z), \quad (3.1)$$

c'est à dire avec une dépendance en  $y$  en  $e^{i\sigma_{y,0}y}$ .

### 1.2 Expression du champ incident

Dans le plan  $(Ox''y')$  perpendiculaire à la direction d'incidence et défini figure 3.2b, le champ électrique incident s'écrit

$$\mathbf{E}_i = \sin(\psi) \mathbf{e}_{x''} + \cos(\psi) \mathbf{e}_{y'}.$$

Dans le repère  $(Ox'y'z)$  lié au plan d'incidence, l'expression du champ devient

$$\mathbf{E}_i = \cos(\theta_i) \sin(\psi) \mathbf{e}_{x'} + \cos(\psi) \mathbf{e}_{y'} + \sin(\theta_i) \sin(\psi) \mathbf{e}_z.$$

Dans le repère lié à la structure, on a ainsi

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_i = & (\cos(\theta_i) \cos(\phi_i) \sin(\psi) - \sin(\phi_i) \cos(\psi)) \mathbf{e}_x \\ & + (\cos(\phi_i) \cos(\psi) + \cos(\theta_i) \sin(\phi_i) \sin(\psi)) \mathbf{e}_y \\ & + \sin(\theta_i) \sin(\psi) \mathbf{e}_z. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Le champ magnétique  $\mathbf{H}_i$  s'exprime en fonction du champ électrique par

$$\mathbf{H}_i = \frac{\mathbf{k}_i \wedge \mathbf{E}_i}{\omega \mu}$$

avec

$$\mathbf{k}_i = k_i [\sin(\theta_i) \cos(\phi_i) \mathbf{e}_x + \sin(\theta_i) \sin(\phi_i) \mathbf{e}_y - \cos(\theta_i) \mathbf{e}_z]$$

Ce qui donne pour  $\mathbf{H}_i$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_i = \frac{k_i}{\omega \mu} [ & (\sin(\phi_i) \sin(\psi) + \cos(\theta_i) \cos(\phi_i) \cos(\psi)) \mathbf{e}_x \\ & + (\cos(\theta_i) \sin(\phi_i) \cos(\psi) - \cos(\phi_i) \sin(\psi)) \mathbf{e}_y \\ & + \sin(\theta_i) \cos(\psi) \mathbf{e}_z ]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

## 2 Equations différentielles du champ

### 2.1 Ecriture de la relation de dispersion

Le champ est régi par les équations de Maxwell (1.4) dans lesquelles apparaît le produit  $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$ , qui devient, après passage dans l'espace de Fourier, un produit de convolution. De la même façon qu'au chapitre 2-2, l'écriture de ce produit de convolution doit respecter les règles de factorisation de Li une fois les séries tronquées. Pour distinguer les composantes continues et discontinues au passage d'une interface, on définit un vecteur unitaire  $\mathbf{N}$  normal à l'interface.

La relation de dispersion s'écrit

$$\begin{aligned} [\mathbf{D}] &= [\epsilon \mathbf{E}] \\ &= [\epsilon \mathbf{E}_T + \epsilon \mathbf{E}_N] \end{aligned}$$

et en utilisant les règles de Li,

$$[\mathbf{D}] = \llbracket \epsilon \rrbracket [\mathbf{E}_T] + \left[ \left[ \frac{1}{\epsilon} \right] \right]^{-1} [\mathbf{E}_N]. \quad (3.4)$$

Les vecteurs  $\mathbf{E}_T$  et  $\mathbf{E}_N$  s'obtiennent à partir de  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{N}$  :

$$\mathbf{E}_N = \mathbf{N}(\mathbf{N} \cdot \mathbf{E}) \quad \text{et} \quad \mathbf{E}_T = \mathbf{E} - \mathbf{E}_N,$$

soit en posant  $(\mathbf{N}\mathbf{N})$  la matrice de composantes  $(\mathbf{N}\mathbf{N})_{ij} = N_i N_j$

$$\mathbf{E}_N = (\mathbf{N}\mathbf{N})\mathbf{E} \quad \text{et} \quad \mathbf{E}_T = \mathbf{E} - (\mathbf{N}\mathbf{N})\mathbf{E}.$$

La relation de dispersion (3.4) peut alors s'écrire

$$\begin{aligned} [\mathbf{D}] &= \llbracket \epsilon \rrbracket ([\mathbf{E}] - [(\mathbf{N}\mathbf{N})\mathbf{E}]) + \left[ \left[ \frac{1}{\epsilon} \right] \right]^{-1} [(\mathbf{N}\mathbf{N})\mathbf{E}] \\ &= \llbracket \epsilon \rrbracket [\mathbf{E}] - \left( \llbracket \epsilon \rrbracket - \left[ \left[ \frac{1}{\epsilon} \right] \right]^{-1} \right) \llbracket \mathbf{N}\mathbf{N} \rrbracket [\mathbf{E}]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

La structure étant invariante selon  $y$ , on a  $N_y = 0$ . En développant la matrice  $(NN)$ , on a

$$[D] = [\epsilon][E] - \left([\epsilon] - \left[\frac{1}{\epsilon}\right]^{-1}\right) \begin{pmatrix} [N_x^2] & 0 & [N_x N_z] \\ 0 & 0 & 0 \\ [N_x N_z] & 0 & [N_z^2] \end{pmatrix} [E]. \quad (3.6)$$

En tenant compte de l'égalité  $[N_x^2] + [N_z^2] = 1$ , on peut simplifier l'expression de  $D$  en

$$[D] = \begin{pmatrix} [\epsilon][N_z^2] + \left[\frac{1}{\epsilon}\right]^{-1}[N_x^2] & 0 & -([\epsilon] - \left[\frac{1}{\epsilon}\right]^{-1})[N_x N_z] \\ 0 & [\epsilon] & 0 \\ -([\epsilon] - \left[\frac{1}{\epsilon}\right]^{-1})[N_x N_z] & 0 & [\epsilon][N_x^2] + \left[\frac{1}{\epsilon}\right]^{-1}[N_z^2] \end{pmatrix} [E]. \quad (3.7)$$

En pratique nous travaillerons avec la grandeur  $[k^2 E] = \omega\mu[D]$  plutôt qu'avec  $[D]$ , ce qui permet d'éliminer les constantes physiques  $\epsilon_0$ ,  $\mu_0$  et  $c$  des équations et d'assurer ainsi une plus grande homogénéité numérique des grandeurs afin de minimiser l'effet des erreurs d'arrondi. De la relation (3.7) nous déduisons

$$[k^2 E] = \begin{pmatrix} [k^2][N_z^2] + \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1}[N_x^2] & 0 & -([k^2] - \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1})[N_x N_z] \\ 0 & [k^2] & 0 \\ -([k^2] - \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1})[N_x N_z] & 0 & [k^2][N_x^2] + \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1}[N_z^2] \end{pmatrix} [E]. \quad (3.8)$$

On appelle  $Q$  la matrice, telle que  $[k^2 E] = Q[E]$ . On a

$$[k^2 E] = \begin{pmatrix} Q_{xx} & 0 & Q_{xz} \\ 0 & Q_{yy} & 0 \\ Q_{zx} & 0 & Q_{zz} \end{pmatrix} [E], \quad (3.9)$$

avec

$$Q_{xx} = [k^2][N_z^2] + \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1}[N_x^2] \quad (3.10a)$$

$$Q_{yy} = [k^2] \quad (3.10b)$$

$$Q_{xz} = -([k^2] - \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1})[N_x N_z] \quad (3.10c)$$

$$Q_{zx} = Q_{xz} \quad (3.10d)$$

$$Q_{zz} = [k^2][N_x^2] + \left[\frac{1}{k^2}\right]^{-1}[N_z^2]. \quad (3.10e)$$

De la même façon qu'en 2.2, il est nécessaire de définir une prolongation à tout l'espace du vecteur  $N$ . Dans le cas où la structure comporte une simple

interface pouvant être décrite par une fonction continue  $z = f(x)$ , on peut définir  $N(x, z) = N(x, f(x)) \quad \forall z$ , avec

$$N_x(x, f(x)) = \frac{-\partial f / \partial x}{\sqrt{1 + (\partial f / \partial x)^2}} \quad (3.11)$$

et

$$N_z(x, f(x)) = \frac{1}{\sqrt{1 + (\partial f / \partial x)^2}}. \quad (3.12)$$

## 2.2 Ecriture des équations des champs sous forme intégrable

En développant les équation de Maxwell (1.4) en coordonnées cartésiennes et en posant  $\mathbf{H}' = \omega\mu\mathbf{H}$  afin d'homogénéiser les grandeurs, on obtient

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = iH'_x \end{array} \right. \quad (3.13a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = iH'_y \end{array} \right. \quad (3.13b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = iH'_z \end{array} \right. \quad (3.13c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_z}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial z} = ik^2 E_x \end{array} \right. \quad (3.13d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_x}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial x} = ik^2 E_y \end{array} \right. \quad (3.13e)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_y}{\partial x} + \frac{\partial H_x}{\partial y} = ik^2 E_z. \end{array} \right. \quad (3.13f)$$

En raison de la dépendance des champs en  $\exp(i\sigma_{y,0}y)$ , la dérivation par rapport à  $y$  est équivalente à une multiplication par  $i\sigma_{y,0}$ .

Comme pour le cas classique, on applique une transformation de Fourier (1.19) à l'ensemble des termes du système (3.13), avant de discrétiser l'espace des  $\sigma$ , avec  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ , puis de tronquer les séries de Fourier entre  $-N$  et  $+N$ . On notant  $[A]$  le vecteur composé des  $(2N + 1)$  composantes de Fourier

$A_n = \Delta\sigma\tilde{A}(\sigma_n)$ , le système (3.13) s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} i\sigma_{y,0}[E_z] - \frac{\partial[E_y]}{\partial z} = i[H'_x] \\ \frac{\partial[E_x]}{\partial z} - i\sigma[E_z] = i[H'_y] \\ i\sigma[E_y] - i\sigma_{y,0}[E_x] = i[H'_z] \\ -i\sigma_{y,0}[H'_z] + \frac{\partial[H'_y]}{\partial z} = i[k^2 E_x] \\ -\frac{\partial[H'_x]}{\partial z} + i\sigma[H'_z] = i[k^2 E_y] \\ -i\sigma[H'_y] + i\sigma_{y,0}[H'_x] = i[k^2 E_z]. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.14a) \\ (3.14b) \\ (3.14c) \\ (3.14d) \\ (3.14e) \\ (3.14f) \end{array}$$

Dans ce système apparaissent les six composantes cartésiennes des vecteurs  $[E]$  et  $[H']$ , ainsi que les quatre dérivées par rapport à  $z$  des vecteurs  $[E_x]$ ,  $[E_y]$ ,  $[H'_x]$  et  $[H'_y]$ . Il est possible d'éliminer les vecteurs  $[E_z]$  et  $[H'_z]$  du système à l'aide des relations (3.14c) et (3.14f) afin de mettre le système sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} = f \left( \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} \right). \quad (3.15)$$

La relation de dispersion (3.9) donne,

$$[k^2 E_z] = Q_{zz}[E_z] + Q_{zx}[E_x],$$

soit

$$[E_z] = Q_{zz}^{-1}([k^2 E_z] - Q_{zx}[E_x]). \quad (3.16)$$

En remplaçant  $[k^2 E_z]$  par son expression donnée par (3.14f) on obtient  $[E_z]$  en fonction de  $[E_x]$ ,  $[H'_x]$  et  $[H'_y]$ ,

$$[E_z] = Q_{zz}^{-1}(-Q_{zx}[E_x] + \sigma_{y,0}[H'_x] - \sigma[H'_y]). \quad (3.17)$$

L'équation (3.14a) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial[E_y]}{\partial z} = \sigma_{y,0}[E_z] - [H'_x],$$

soit, en remplaçant  $[E_z]$  par son expression donnée par (3.17),

$$\frac{1}{i} \frac{\partial[E_y]}{\partial z} = -\sigma_{y,0}Q_{zz}^{-1}Q_{zx}[E_x] + (\sigma_{y,0}^2 Q_{zz}^{-1} - \text{Id})[H'_x] - \sigma_{y,0}Q_{zz}^{-1}\sigma[H'_y]. \quad (3.18)$$

L'équation (3.14b) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [E_x]}{\partial z} = \sigma [E_z] + [H'_y],$$

soit, en utilisant (3.17) pour exprimer  $[E_z]$ ,

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [E_x]}{\partial z} = -\sigma Q_{zz}^{-1} Q_{xz} [E_x] + \sigma Q_{zz}^{-1} \sigma_{y,0} [H'_x] + (\text{Id} - \sigma Q_{zz}^{-1} \sigma) [H'_y]. \quad (3.19)$$

L'équation (3.14d) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = \sigma_{y,0} [H'_z] + [k^2 E_x],$$

En remplaçant  $[k^2 E_x]$  par son expression donnée par la relation de dispersion, et  $[H'_z]$  par son expression donnée par (3.14c), cette équation s'écrit

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = -\sigma_{y,0}^2 [E_x] + \sigma_{y,0} \sigma [E_y] + Q_{xx} [E_x] + Q_{xz} [E_z].$$

En remplaçant, dans cette équation,  $[E_z]$  par son expression donnée par (3.17), on obtient

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = & (-\sigma_{y,0}^2 + Q_{xx} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{xz}) [E_x] + \sigma_{y,0} \sigma [E_y] \\ & + \sigma_{y,0} Q_{xz} Q_{zz}^{-1} [H'_x] - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma [H'_y]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

L'équation (3.14e) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = \sigma [H'_z] - [k^2 E_y]$$

En remplaçant  $[k^2 E_y]$  par son expression donnée par la relation de dispersion et  $[H'_z]$  par son expression donnée par (3.14c), cette équation devient

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = -\sigma \sigma_{y,0} [E_x] + \sigma^2 [E_y] - Q_{yy} [E_y]$$

soit,

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = -\sigma \sigma_{y,0} [E_x] + (\sigma^2 - Q_{yy}) [E_y] \quad (3.21)$$

Les quatre équations (3.19), (3.18), (3.21) et (3.20) peuvent s'écrire sous forme matricielle,

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

où la matrice  $M$  est définie par

$$M = i \begin{pmatrix} -\sigma Q_{zz}^{-1} Q_{xz} & 0 & \sigma Q_{zz}^{-1} \sigma_{y,0} & \text{Id} - \sigma Q_{zz}^{-1} \sigma \\ -\sigma_{y,0} Q_{zz}^{-1} Q_{xz} & 0 & \sigma_{y,0}^2 Q_{zz}^{-1} - \text{Id} & -\sigma_{y,0} Q_{zz}^{-1} \sigma \\ -\sigma_{y,0} \sigma & \sigma^2 - Q_{yy} & 0 & 0 \\ -\sigma_{y,0}^2 + Q_{xx} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{xz} & \sigma_{y,0} \sigma & \sigma_{y,0} Q_{xz} Q_{zz}^{-1} & -Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Le champ est donc régi par le système d'équations différentielles couplées (3.22). Ce système représente un accroissement important de la complexité par rapport au cas classique : d'une part la taille du système a doublé, d'autre part la détermination de la matrice  $M$  s'est accrue en complexité puisqu'elle fait intervenir des produits et inversions des matrices  $Q_{xx}$ ,  $Q_{xz}$  et  $Q_{zz}$ , elles même requérant des produits et inversions de matrices pour leur détermination.

### 2.3 Résolution des équations

On définit le vecteur  $[F]$  tel que

$$[F] = \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix}.$$

De la même façon que pour la méthode différentielle classique, il existe une relation linéaire entre  $[F(h)]$  et  $[F(0)]$ ,

$$[F(h)] = P[F(0)]$$

et la matrice  $P$  peut-être obtenue par la méthode d'intégration matricielle (cf. chap. 2-3).

A l'extérieur de la zone modulée ou à l'intérieur d'une couche homogène parallèle à  $(Oxy)$ , on définit le vecteur  $[V]$  constitué des composantes progressives et rétrogrades des projections des champs  $E$  et  $H'$  sur  $(Oy)$ ,

$$[V] = \begin{bmatrix} [V_E^-] \\ [V_H^-] \\ [V_E^+] \\ [V_H^+] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ A_n^- \exp(-i\beta_n z) \\ \vdots \\ B_n^- \exp(-i\beta_n z) \\ \vdots \\ A_n^+ \exp(i\beta_n z) \\ \vdots \\ B_n^+ \exp(i\beta_n z) \\ \vdots \end{bmatrix}.$$



On peut passer d'une représentation du champ sous forme de vecteur  $[F]$  à une représentation sous forme de vecteur  $[V]$  à l'aide de

$$[F] = \Psi[V]$$

avec  $\Psi$ , la matrice définie par

$$\Psi = \begin{pmatrix} P_1 & -P_2 & P_1 & P_2 \\ \text{Id} & 0 & \text{Id} & 0 \\ k^2 P_2 & P_1 & -k^2 P_2 & P_1 \\ 0 & \text{Id} & 0 & \text{Id} \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

où  $P_1$  et  $P_2$  sont des matrices diagonales dont les éléments valent

$$(P_1)_{n,m} = -\delta_{n,m} \frac{\sigma_{y,0} \sigma_n}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} \quad (3.25)$$

et

$$(P_2)_{n,m} = \frac{\beta_n}{k^2 - \sigma_{y,0}^2}. \quad (3.26)$$

Une fois la matrice  $P$  obtenue, on en déduit la matrice  $T$ , à l'aide de la relation

$$T = \Psi^{-1} P \Psi.$$

Les matrices  $T$  permettent ensuite l'obtention de la matrice  $S$  (cf. chap. 2.1) et le champ diffracté est obtenu directement par multiplication du champ incident par la matrice  $S$ .

## 2.4 Cas particulier d'une structure invariante selon $(Oz)$

Dans le cas où la structure est invariante selon  $(Oz)$ , les parois sont verticales à l'intérieur de la zone modulée et la normale est parallèle à  $(Ox)$ . On a donc  $N_x = 1$ ,  $N_y = N_z = 0$  et la matrice  $Q$  (3.8) devient

$$Q = \begin{pmatrix} \left[ \frac{1}{k^2} \right]^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \llbracket k^2 \rrbracket & 0 \\ 0 & 0 & \llbracket k^2 \rrbracket \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Le système d'équations décrivant le champ à l'intérieur de la zone modulée devient ainsi

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix}, \quad (3.28)$$

avec

$$M = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma_{y,0} & \text{Id} - \sigma \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma \\ 0 & 0 & \sigma_{y,0}^2 \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} - \text{Id} & -\sigma_{y,0} \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma \\ -\sigma_{y,0} \sigma & \sigma^2 - \llbracket k^2 \rrbracket & 0 & 0 \\ -\sigma_{y,0}^2 + \llbracket \frac{1}{k^2} \rrbracket^{-1} & \sigma_{y,0} \sigma & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Cette formulation est nettement plus simple que la formulation du cas général, en raison de la simplification de certains termes et surtout grâce à la constance de la direction de la normale. La matrice  $M$  étant invariante selon  $z$ , le système peut être intégré à partir d'un algorithme donnant les valeurs propres et vecteurs propres de la matrices  $M$  (voir chap. 2-2.3).

### 3 Expression de l'intensité diffractée

L'intensité est obtenue à partir du flux du vecteur de Poynting à travers une surface parallèle au plan moyen de la structure.

$$\Phi = \mathcal{P} \cdot \mathbf{S} = \mathcal{P}_z S \quad (3.30)$$

avec

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \wedge \mathbf{H}^*. \quad (3.31)$$

Pour une direction correspondant à l'indice  $n$ , les composantes du vecteur de Poynting selon  $z$  des champs réfléchis et transmis s'écrivent

$$\mathcal{P}_n^+ = \frac{1}{2} (A_{x,n}^+ B_{y,n}^{+*} - A_{y,n}^+ B_{x,n}^{+*}), \quad (3.32)$$

pour le champ réfléchi et

$$\mathcal{P}_n^- = \frac{1}{2} (A_{x,n}^- B_{y,n}^{-*} - A_{y,n}^- B_{x,n}^{-*}), \quad (3.33)$$

pour le champ transmis. Les composantes  $A_{y,n}^+$  et  $B_{y,n}^+$  s'identifient aux  $A_n^+$  et  $B_n^+$  du vecteur  $[V(h)]$  et les  $A_{y,n}^-$  et  $B_{y,n}^-$  s'identifient aux  $A_n^-$  et  $B_n^-$  du vecteur  $[V(0)]$ . Les composantes  $A_{x,n}^\pm$  et  $B_{x,n}^\pm$  sont liées aux  $A_n^\pm$  et  $B_n^\pm$  par (cf. Annexe

C)

$$A_{x,n}^+ = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (-\sigma_{y,0} \sigma A_n^+ + \beta B_n^+) \quad (3.34)$$

$$B_{x,n}^+ = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (-k^2 \beta A_n^+ - \sigma_{y,0} \sigma B_n^+) \quad (3.35)$$

$$A_{x,n}^- = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (-\sigma_{y,0} \sigma A_n^- - \beta B_n^-) \quad (3.36)$$

$$B_{x,n}^- = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (k^2 \beta A_n^- - \sigma_{y,0} \sigma B_n^-). \quad (3.37)$$

Pour une structure périodique l'efficacité de l'ordre  $n$  est obtenue par

$$e_n = \frac{S}{\Phi_0} \mathcal{P}_n \quad (3.38)$$

avec  $\Phi_0$  le flux incident, tel que

$$\Phi_0 / S = \sum_n \mathcal{P}_n^i. \quad (3.39)$$

Pour une structure non périodique l'intensité  $dI(\theta_n)/d\theta$  est donnée (cf. chap. 1) par

$$\frac{dI(\theta_n)}{d\theta} = \frac{1}{\Phi_0} \frac{d\Phi(\theta_n)}{d\theta} = \frac{L}{\lambda} \frac{S}{\Phi_0} \nu \mathcal{P}_n \cos(\theta), \quad (3.40)$$

$L$  étant la longueur de la surface éclairée et  $\nu$  l'indice de réfraction du substrat ou du superstrat selon que l'on mesure l'intensité transmise ou réfléchie.

## 4 Validation

Le tableau 3.1 compare les résultats issus de la méthode différentielle dans le cas d'une invariance selon (Oz) (RCWA) avec ceux issus du programme commercial GSolver. Les différences obtenues par les deux programmes sont de l'ordre de 0,1 % ce qui est satisfaisant étant donné que tous les paramètres utilisés par le programme commercial ne sont pas connus, en particulier la précision de la définition du profil.

Réflexion		
Ordre	$e_{DM}$	$e_{GSolver}$
3	0,002044	0,002050
2	0,002473	0,002472
1	0,004218	0,004216
0	0,012033	0,012037
-1	0,009170	0,009151
Transmission		
Ordre	$e_{DM}$	$e_{GSolver}$
5	0,017123	0,017136
4	0,046808	0,046865
3	0,029673	0,029760
2	0,056981	0,056918
1	0,395220	0,395209
0	0,040444	0,040365
-1	0,240370	0,240517
-2	0,105740	0,105639
-3	0,037699	0,037664

**Tableau 3.1** Comparaison des efficacités obtenues à partir de la formulation (3.22) et par le logiciel commercial GSolver basé sur la méthode RCWA, dans le cas d'un réseau lamellaire en incidence conique. Le réseau utilisé à un indice de réfraction  $\nu = 1,5$ , une période  $d = 3,1\lambda$ , une hauteur  $h = 0,1\lambda$ , la largeur d'une ligne est  $d/2$ . Les angles d'incidence sont  $\theta_i = 30^\circ$  et  $\phi_i = 30^\circ$ , la polarisation fait un angle  $\Psi = 45^\circ$  avec la normale au plan d'incidence.



## Chapitre 4

# Méthode différentielle tridimensionnelle

Les méthodes de résolution décrites aux chapitres 1 et 3 pour des structures à deux dimensions peuvent également être généralisées à des structures tridimensionnelles.

Cette généralisation présente cependant deux difficultés :

- Une difficulté liée à l'accroissement de la complexité. D'une part, une dimension supplémentaire est introduite, ce qui implique que les grandeurs qui étaient représentées sous forme de vecteurs à une dimension (les composantes des champs par exemple), deviennent des vecteurs d'un espace à deux dimensions et les matrices associées à ces vecteurs deviennent des matrices à quatre dimensions. D'autre part, il n'existe plus aucune direction d'invariance pouvant permettre une simplification des équations. Cette complexité se traduit par une difficulté dans l'établissement des équations du champ et dans la mise en œuvre des algorithmes de résolution.
- Une difficulté numérique. Si l'on tronque les séries, avec le même paramètre  $N$ , selon les dimensions  $x$  et  $y$ , le nombre des harmoniques retenues est proportionnel à  $N^2$ , ce qui conduit à des matrices de taille proportionnelle à  $N^4$  et à un nombre d'opérations proportionnel à  $N^6$  pour un simple produit de matrice. Par exemple, pour  $N = 15$  le nombre d'opérations pour un produit de matrices sera de l'ordre de  $10^{11}$ .

Historiquement plusieurs implémentations de la méthode différentielle ou de méthodes apparentées ont été proposées dans le cas de structures bipériodiques.

La méthode différentielle classique fut dès 1978 étendue au cas des structures bipériodiques [38, 39], toutefois l'absence de respect des règles de factorisation ne permettait d'aboutir à des résultats corrects que dans un nombre limité de cas (matériaux diélectriques, faibles épaisseurs).

D'autres formulations, basées sur la méthode RCWA étendue à la double

périodicité, furent également proposées à partir de 1993 [40, 41], toujours avec les mêmes limitations du fait de l'absence de prise en compte des règles de factorisation.

En 1997 L. Li [5] proposa et testa une formulation tenant compte des règles de factorisation correctes dans le cas de structures invariantes selon la direction de propagation et dont les parois sont parallèles aux directions de périodicité. Cette formulation a été largement utilisée depuis et a donné lieu à de nombreuses applications (explication de l'effet de transmission extraordinaire par des réseaux de trous sub-longueur d'onde [42, 43], cristaux photoniques [44], métrologie en microélectronique [45],...), mais elle reste limitée à des structures dont la forme ne correspond pas toujours à la réalité.

E. Popov et M. Nevière proposèrent en 2001 une formulation tenant compte des règles de factorisation correctes pour une structure bipériodique de forme quelconque.

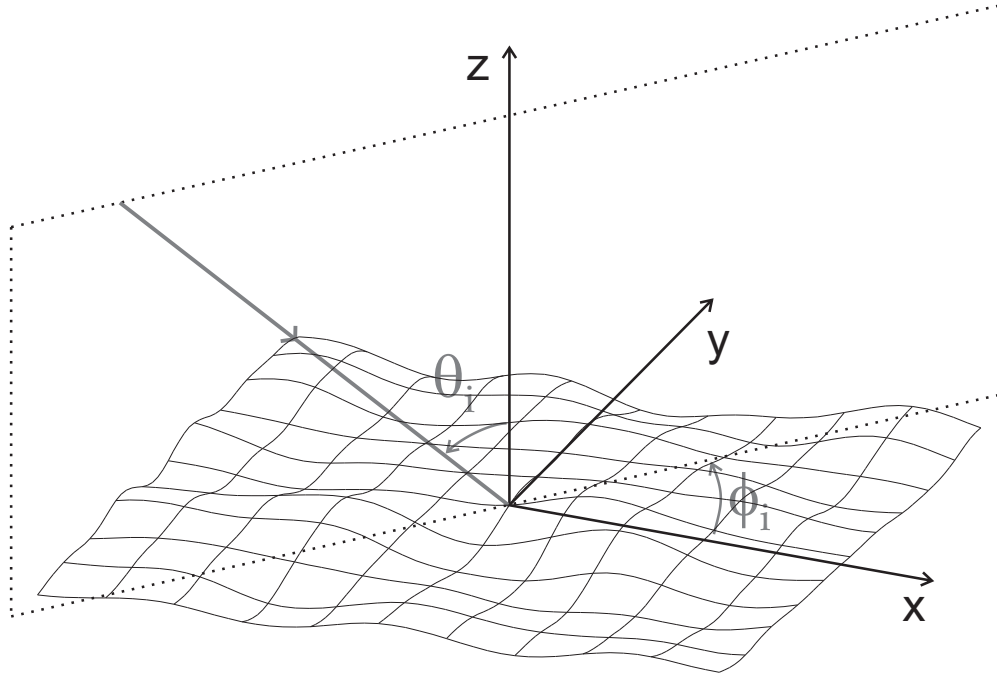
En 2007, T. Schuster et al. [46] proposèrent et testèrent une adaptation de la formulation proposée par E. Popov et M. Nevière aux algorithmes RCWA publiés par M.G. Moharam et al. [36], dans le cas de structures invariantes selon l'axe de propagation et quelconques selon les deux autres dimensions. L'invariance selon l'axe de propagation permet d'une part une simplification des équations et surtout l'emploi d'un algorithme utilisant les vecteurs propres et valeurs propres du système, dont la rapidité permet de faire face à la lourdeur numérique du problème.

Les formulations mises en œuvre jusqu'à présent impliquent donc toutes des conditions restrictives sur la forme de la structure. Ces formulations sont cependant parfois appliquées à des structures quelconques, mais la convergence est extrêmement lente dans de tels cas. Si dans le cas de structures bidimensionnelles il est possible d'augmenter la valeur du nombre d'harmoniques pour compenser cette lenteur de convergence, ce n'est plus le cas en trois dimensions où les durées de calcul limitent fortement le nombre d'harmoniques qu'il est possible de prendre en compte.

L'obtention d'un résultat correct pour une structure en trois dimensions, implique donc que la formulation utilisée soit en adéquation avec la forme réelle de la structure.

La formulation proposée par Popov et al. dans le cas d'une structure quelconque, se heurtait jusqu'à présent à un obstacle numérique : Un calcul d'ordre de grandeur montre, qu'en utilisant la méthode de tir, il faudrait plus de 3 mois pour atteindre  $N = 15$ , avec 50 pas d'intégration, sur un processeur Opteron à 1,8 Ghz. La méthode d'intégration matricielle décrite au chap. 2-3 ramène cette durée à une valeur beaucoup plus raisonnable : 13,7 heures.

Ce chapitre traite donc de la mise en œuvre et de la validation de la méthode différentielle, avec utilisation de la méthode d'intégration matricielle, dans le cas de structure tridimensionnelles de forme quelconque.



**Figure 4.1** Définition du repère dans le cas d'une structure tridimensionnelle.

## 1 Définition du problème

### 1.1 Structure et conditions d'éclairement

#### Définition de la structure

On considère des structures périodiques selon deux directions orthogonales, ou non périodiques<sup>1</sup>.

La structure (le motif, dans le cas d'une structure périodique) est définie par la valeur de son indice de réfraction complexe en tout point de l'espace. Le matériau doit être localement isotrope, linéaire et non magnétique ( $\mu = \mu_0$ ). Aucune contrainte n'existe concernant la forme de la structure, le nombre de matériaux ou le fait que l'indice de réfraction varie de façon discontinue ou continue.

Les dimensions de la structure sont cependant limitées par les contraintes numériques, la durée du calcul étant proportionnelle à la puissance 3 de l'aire éclairée, ou de l'aire du motif, et proportionnelle à son épaisseur. En pratique les limites supérieures sont de l'ordre d'une dizaine de micromètres pour des

<sup>1</sup> Notons qu'en pratique, les structures périodiques constitueront la majorité des applications, en raison du grand nombre d'harmoniques et donc des durées importantes de calcul nécessaires à la modélisation des structures non périodiques.



longueurs d'ondes dans le visible.

### Définition du repère

Les axes sont définis (Fig. 4.1) d'une façon similaire au cas conique. Dans le cas où la structure est périodique, les directions  $(Ox)$  et  $(Oy)$  correspondent aux directions de périodicité.

### Définition du champ incident

Le champ incident peut être constitué d'une onde plane ou d'une superposition d'ondes planes. Dans le cas où le champ incident est constitué par une onde plane dont le plan d'incidence fait un angle  $\phi_i$  avec la direction  $(Ox)$ , dont l'angle d'incidence est  $\theta_i$  et dont la polarisation est linéaire et fait un angle  $\psi$  avec la normale au plan d'incidence, les amplitudes des vecteurs  $E$  et  $H$  du champ incident s'expriment par (cf. chap. 3-1)

$$\begin{aligned} E_i = & (\cos(\theta_i) \cos(\phi_i) \sin(\psi) - \sin(\phi_i) \cos(\psi)) e_x \\ & + (\cos(\phi_i) \cos(\psi) + \cos(\theta_i) \sin(\phi_i) \sin(\psi)) e_y \\ & + \sin(\theta_i) \sin(\psi) e_z \end{aligned} \quad (4.1)$$

et

$$\begin{aligned} H_i = & \frac{k_i}{\omega \mu} [(\sin(\phi_i) \sin(\psi) + \cos(\theta_i) \cos(\phi_i) \cos(\psi)) e_x \\ & + (\cos(\theta_i) \sin(\phi_i) \cos(\psi) - \cos(\phi_i) \sin(\psi)) e_y \\ & + \sin(\theta_i) \cos(\psi) e_z] ., \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec  $k_i = 2\pi\nu/\lambda$ , où  $\nu$  est l'indice de réfraction du superstrat.

## 1.2 Espace de Fourier à 2 dimensions : définitions et notations

### Transformation de Fourier bidimensionnelle

La transformée de Fourier à deux dimensions,  $\tilde{F}(\sigma_x, \sigma_y)$ , de la fonction  $F(x, y)$  est définie par

$$\tilde{F}(\sigma_y, \sigma_x) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(x, y) e^{-i\sigma_x x} e^{-i\sigma_y y} dx dy. \quad (4.3)$$

### Représentation des grandeurs discrétisées et tronquées

On discrétise ensuite l'espace des  $\sigma$ . Nous choisissons, en particulier pour une raison de simplicité, une discrétisation à pas constants, telle que

$$\sigma_x(n) = \sigma_{x,0} + n\Delta\sigma_x \quad (4.4)$$

$$\sigma_y(n) = \sigma_{y,0} + n\Delta\sigma_y, \quad (4.5)$$

avec  $\sigma_{x,0} = k \sin(\theta_i) \cos(\phi_i)$  et  $\sigma_{y,0} = k \sin(\theta_i) \sin(\phi_i)$ . Dans le cas où la structure est périodique, les pas de discrétisation doivent être choisis tels que  $\Delta\sigma_x = 2\pi/L_x$  et  $\Delta\sigma_y = 2\pi/L_y$ , où  $L_x$  et  $L_y$  sont les périodes selon  $x$  et  $y$ .

Les grandeurs sont ensuite tronquées de façon symétrique, entre  $-N_x$  et  $N_x$  et entre  $-N_y$  et  $N_y$ .

Les grandeurs ainsi obtenues peuvent s'exprimer sous forme d'une matrice de dimensions  $(2N_x + 1) \times (2N_y + 1)$ .

$$[F] = \begin{pmatrix} F_{(-N_y, -N_x)} & \cdots & F_{(-N_y, N_x)} \\ & \ddots & \\ \vdots & F_{(n, m)} & \vdots \\ & \ddots & \\ F_{(N_y, -N_x)} & \cdots & F_{(N_y, N_x)} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

en utilisant la notation

$$F_{(n, m)} = \tilde{F}(\sigma_y(n), \sigma_x(m)) \Delta\sigma_x \Delta\sigma_y. \quad (4.7)$$

Il est aussi possible de représenter ces données sous la forme d'un vecteur unidimensionnel constitué de la succession des lignes de la matrice (4.6) :

$$[F] = \begin{pmatrix} F_{(-N_y, -N_x)} \\ \vdots \\ F_{(-N_y, N_x)} \\ \vdots \\ F_{(n, m)} \\ \vdots \\ F_{(N_y, -N_x)} \\ \vdots \\ F_{(N_y, N_x)} \end{pmatrix}; \quad (4.8)$$

C'est cette forme que nous adoptons car elle est plus facile à manipuler numériquement.

### Matrices de Toeplitz associées au produit de convolution

Soit la fonction  $H(x, y) = F(x, y)G(x, y)$ . La transformée de Fourier de  $H$  est donnée par le produit de convolution de  $\tilde{F}$  et  $\tilde{G}$ ,

$$\tilde{H}(\sigma_y, \sigma_x) = (\tilde{F} * \tilde{G})(\sigma_y, \sigma_x), \quad (4.9)$$

avec

$$(\tilde{F} * \tilde{G})(\sigma_y, \sigma_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{F}(\sigma_y - \sigma'_y, \sigma_x - \sigma'_x) \tilde{G}(\sigma'_y, \sigma'_x) d\sigma'_x d\sigma'_y. \quad (4.10)$$

Dans le cas où les grandeurs sont discrétisées et tronquées on a

$$\begin{aligned} (\tilde{F} * \tilde{G})(\sigma_y(n), \sigma_x(m)) &= \sum_{n'=-N_y}^{N_y} \sum_{m'=-N_x}^{N_x} \tilde{F}(\sigma_y(n) - \sigma_y(n'), \sigma_x(m) - \sigma_x(m')) \\ &\quad \times \tilde{G}(\sigma_y(n'), \sigma_x(m')) \Delta\sigma_x \Delta\sigma_y, \end{aligned} \quad (4.11)$$

qui, en utilisant (4.7), s'écrit plus simplement

$$(F * G)_{(n,m)} = \sum_{n'=-N_y}^{N_y} \sum_{m'=-N_x}^{N_x} F_{(n-n', m-m')} G_{(n', m')}. \quad (4.12)$$

Le vecteur  $[H]$  composé de l'ensemble des  $(2N_x + 1)(2N_y + 1)$  éléments  $H_{(n,m)}$  peut être obtenu par le produit de la matrice de Toeplitz  $\llbracket F \rrbracket$  et du vecteur  $[G]$ ,

$$[H] = \llbracket F \rrbracket [G]. \quad (4.13)$$

La matrice  $\llbracket F \rrbracket$  est une matrice de dimensions  $(2N_x + 1)(2N_y + 1) \times (2N_x + 1)(2N_y + 1)$  dont les éléments  $f_{i,j}$  sont définis par

$$f_{i,j} = \tilde{F}(\sigma_y(n(i)) - \sigma_y(n(j)), \sigma_x(m(i)) - \sigma_x(m(j))) \Delta\sigma_x \Delta\sigma_y, \quad (4.14)$$

ou plus simplement, en utilisant (4.7)

$$f_{i,j} = F_{(n(i)-n(j), m(i)-m(j))}. \quad (4.15)$$

La valeur de  $n(i)$  correspond au numéro de la ligne, compté entre  $-N_y$  et  $+N_y$ , de l'élément de la matrice (4.6) correspondant au  $i^{\text{ème}}$  élément du vecteur (4.8). De même  $m(i)$  désigne le numéro de la colonne, compté entre  $-N_x$  et  $+N_x$ , de l'élément de la matrice (4.6) correspondant au  $i^{\text{ème}}$  élément du vecteur (4.8).

### Passage de l'espace de Fourier à l'espace réel

On repasse dans l'espace réel, à partir des grandeurs discrétisées et tronquées à l'aide de la relation

$$F(x, y) = \sum_{n=-N_y}^{N_y} \sum_{m=-N_x}^{N_x} \tilde{F}(\sigma_y(n), \sigma_x(m)) e^{i(\sigma_x(m)x + \sigma_y(n)y)} \Delta\sigma_x \Delta\sigma_y, \quad (4.16)$$

soit, en utilisant (4.7),

$$F(x, y) = \sum_{n=-N_y}^{N_y} \sum_{m=-N_x}^{N_x} F_{(n,m)} e^{i(\sigma_x(m)x + \sigma_y(n)y)}. \quad (4.17)$$

## 2 Equations du champ dans le cas d'une structure de forme quelconque

### 2.1 Relation de dispersion

De même que pour les cas classique et conique, la relation de dispersion  $D(x, y, z) = \epsilon(x, y, z)E(x, y, z)$  fait apparaître un produit de convolution dans l'espace de Fourier et il convient de tenir compte de la continuité des fonctions pour une bonne convergence. On définit un vecteur  $N$  normal à la surface et les règles de L. Li conduisent à l'écriture suivante pour la relation de dispersion :

$$[D] = [\epsilon][E] - \left( [\epsilon] - \left[ \frac{1}{\epsilon} \right]^{-1} \right) [NN][E], \quad (4.18)$$

qui équivaut à

$$[k^2 E] = [k^2][E] - \left( [k^2] - \left[ \frac{1}{k^2} \right]^{-1} \right) [NN][E]. \quad (4.19)$$

Si l'on pose  $\Delta = [k^2] - \left[ \frac{1}{k^2} \right]^{-1}$ , la relation de dispersion, s'écrit sous forme matricielle

$$[k^2 E] = Q[E], \quad (4.20)$$

avec

$$Q = \begin{pmatrix} [k^2] - \Delta[N_x N_x] & -\Delta[N_x N_y] & -\Delta[N_x N_z] \\ -\Delta[N_y N_x] & [k^2] - \Delta[N_y N_y] & -\Delta[N_y N_z] \\ -\Delta[N_z N_x] & -\Delta[N_z N_y] & [k^2] - \Delta[N_z N_z] \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

On appellera par la suite,  $Q_{xx}$ ,  $Q_{xy}$ ,  $Q_{xz}$ , etc., les composantes de cette matrice.

## 2.2 Détermination du vecteur $N$

Tout en s'identifiant avec la normale à la surface au niveau des interfaces, le vecteur  $N$  doit être défini pour l'ensemble des points de la structure.

Plusieurs cas peuvent être distingués selon la nature de la structure et la façon dont elle est définie.

Si la structure est constituée de deux milieux séparés par une interface pouvant être décrite par une fonction continue  $z = f(x, y)$ , le vecteur  $N$  sur l'interface peut être déterminé simplement à partir des dérivées partielles de la fonction  $f(x, y)$ ,

$$N_x(x, y, f(x, y)) = - \frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}} \quad (4.22)$$

$$N_y(x, y, f(x, y)) = - \frac{\frac{\partial f}{\partial y}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}} \quad (4.23)$$

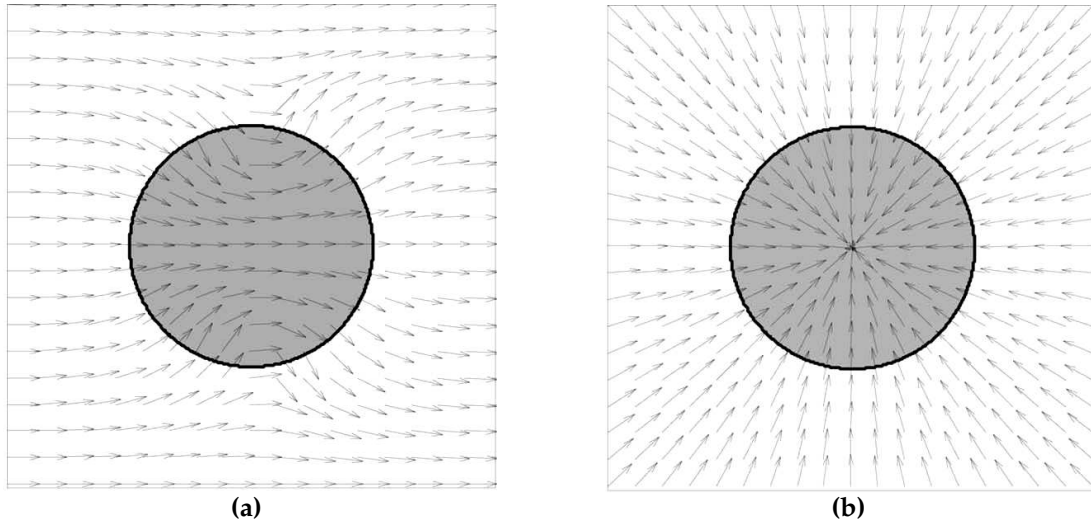
$$N_z(x, y, f(x, y)) = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}}. \quad (4.24)$$

La prolongation au delà de l'interface peut s'effectuer simplement en considérant que  $N(x, y, z) = N(x, y, f(x, y))$ ,  $\forall z \in [0, h]$ .

Dans le cas où la structure est constituée de plusieurs milieux séparés par des interfaces pouvant être décrites par des fonctions continues, les équations (4.22-4.24) permettent toujours de déterminer  $N$  sur chaque interface et une interpolation de ces valeurs doit être utilisée pour l'extension à l'ensemble de la structure.

Dans le cas où la structure est invariante selon  $(Oz)$ , les fonctions décrivant les interfaces ne sont pas continues. Les parois étant verticales à l'intérieur de la zone modulée, le vecteur  $N$  est compris dans le plan  $(Oxy)$ . Après avoir déterminé la valeur de  $N$  dans l'espace à deux dimensions  $(Oxy)$ , ce qui n'est pas forcément trivial (cf. Fig. 4.2 par exemple), on peut l'étendre aux trois dimensions en le considérant constant selon  $z$ . Une discussion détaillée sur le choix du champ du vecteur normal dans le cas de ces structures peut être trouvée dans [46].

Un autre cas est celui où la structure est définie par un tableau à trois dimensions donnant la valeur de l'indice de réfraction en tout point de la structure. Ce cas est très intéressant car il permet de définir des structures complexes (inclusions de matériaux, variation progressive de l'indice, etc.). Dans



**Figure 4.2** Exemples d'extension du vecteur normal au delà de la zone de l'interface dans le cas d'un réseau de trous cylindriques par T. Schuster et al. [46] (données fournies par l'auteur et présentées avec son autorisation). Le choix de l'extension du vecteur normal au delà de l'interface n'est pas unique. Deux possibilités sont ici présentées : (a) Extension du champ obtenue par analogie électrostatique. (b) Extension radiale du champ.

ce cas la structure est donnée sous une forme pixelisée et il semble nécessaire de définir une longueur de lissage pour pouvoir déterminer la normale. Le choix de cette longueur résulte d'un compromis entre régularité de la variation, c'est à dire affranchissement de l'effet de pixelisation et finesse des détails pris en compte.

Pour l'instant, le seul cas pris en compte de façon automatisée par notre programme est le cas d'une interface unique définie par une fonction continue. Les autres demandent l'entrée manuelle du champ du vecteur normal par l'utilisateur, ce qui est possible dans le cas de certaines structures simples (Fig. 4.2-b par exemple). A terme, il est souhaitable que l'ensemble des cas présentés ici soient traités de façon automatisée à partir du profil.

### 2.3 Expression du système d'équations différentielles

Les équations de Maxwell (1.4) dans l'espace réel, s'écrivent en coordonnées cartésiennes

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = iH'_x \end{array} \right. \quad (4.25a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = iH'_y \end{array} \right. \quad (4.25b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = iH'_z \end{array} \right. \quad (4.25c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_z}{\partial y} + \frac{\partial H_y}{\partial z} = ik^2 E_x \end{array} \right. \quad (4.25d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_x}{\partial z} + \frac{\partial H_z}{\partial x} = ik^2 E_y \end{array} \right. \quad (4.25e)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial H_y}{\partial x} + \frac{\partial H_x}{\partial y} = ik^2 E_z. \end{array} \right. \quad (4.25f)$$

On transforme le système (4.25) en un système d'équations couplées portant sur la seule variable  $z$ , en effectuant sur l'ensemble du système, une transformation de Fourier (4.3) portant sur les variables  $x$  et  $y$ .

On discrétise ensuite l'espace à deux dimension des fréquences spatiales selon (4.4) puis on tronque les séries entre  $-N_x$  et  $N_x$  et entre  $-N_y$  et  $N_y$ . Le système (4.25) devient

$$\left\{ \begin{array}{l} i\sigma_y[E_z] - \frac{\partial[E_y]}{\partial z} = i[H'_x] \end{array} \right. \quad (4.26a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial[E_x]}{\partial z} - i\sigma_x[E_z] = i[H'_y] \end{array} \right. \quad (4.26b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} i\sigma_x[E_y] - i\sigma_y[E_x] = i[H'_z] \end{array} \right. \quad (4.26c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -i\sigma_y[H'_z] + \frac{\partial[H'_y]}{\partial z} = i[k^2 E_x] \end{array} \right. \quad (4.26d)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\partial[H'_x]}{\partial z} + i\sigma_x[H'_z] = i[k^2 E_y] \end{array} \right. \quad (4.26e)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -i\sigma_x[H'_y] + i\sigma_y[H'_x] = i[k^2 E_z], \end{array} \right. \quad (4.26f)$$

où les grandeurs entre crochets représentent les vecteurs de  $(2N_x + 1)(2N_y + 1)$  éléments qui sont définis par (4.8).

Comme pour le cas conique, nous souhaitons éliminer les vecteurs  $[E_z]$  et  $[H'_z]$  de ce système afin de le mettre sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} = f \left( \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} \right).$$

La relation de dispersion (4.20) donne,

$$[k^2 E_z] = Q_{zx}[E_x] + Q_{zx}[E_y]Q_{zz}[E_z],$$

soit

$$[E_z] = Q_{zz}^{-1}([k^2 E_z] - Q_{zx}[E_x] - Q_{zy}[E_y]). \quad (4.27)$$

En remplaçant  $[k^2 E_z]$  par son expression donnée par (4.26f) on obtient  $[E_z]$  en fonction de  $[E_x]$ ,  $[H'_x]$  et  $[H'_y]$ ,

$$[E_z] = Q_{zz}^{-1}(-Q_{zx}[E_x] - Q_{zy}[E_y] + \sigma_y[H'_x] - \sigma_x[H'_y]). \quad (4.28)$$

L'équation (4.26a) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [E_y]}{\partial z} = \sigma_y[E_z] - [H'_x],$$

soit, en remplaçant  $[E_z]$  par son expression donnée par (4.28),

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \frac{\partial [E_y]}{\partial z} = & -\sigma_y Q_{zz}^{-1} Q_{zx}[E_x] - \sigma_y Q_{zz}^{-1} Q_{zy}[E_y] \\ & + (\sigma_y Q_{zz}^{-1} \sigma_y - \text{Id})[H'_x] - \sigma_y Q_{zz}^{-1} \sigma_x[H'_y], \end{aligned} \quad (4.29)$$

L'équation (4.26b) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [E_x]}{\partial z} = \sigma_x[E_z] + [H'_y],$$

soit, en utilisant (4.28) pour exprimer  $[E_z]$ ,

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \frac{\partial [E_x]}{\partial z} = & -\sigma_x Q_{zz}^{-1} Q_{zx}[E_x] - \sigma_x Q_{zz}^{-1} Q_{zy}[E_y] \\ & + \sigma_x Q_{zz}^{-1} \sigma_y[H'_x] + (\text{Id} - \sigma_x Q_{zz}^{-1} \sigma_x)[H'_y], \end{aligned} \quad (4.30)$$

L'équation (4.26d) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = \sigma_y[H'_z] + [k^2 E_x],$$

En remplaçant  $[k^2 E_x]$  par son expression donnée par la relation de dispersion, et  $[H'_z]$  par son expression donnée par (4.26c), cette équation s'écrit

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = (Q_{xx} - \sigma_y^2)[E_x] + (Q_{xy} + \sigma_y \sigma_x)[E_y] + Q_{xz}[E_z],$$



En remplaçant, dans cette équation,  $[E_z]$  par son expression donnée par (4.28), on obtient

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \frac{\partial [H'_y]}{\partial z} = & + (Q_{xx} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{zx} - \sigma_y^2) [E_x] + (Q_{xy} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{zy} + \sigma_y \sigma_x) [E_y] \\ & + Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma_y [H'_x] - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma_x [H'_y], \end{aligned} \quad (4.31)$$

L'équation (4.26e) donne

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = \sigma_x [H'_z] - [k^2 E_y]$$

En remplaçant  $[k^2 E_y]$  par son expression donnée par la relation de dispersion et  $[H'_x]$  par son expression donnée par (4.26c), cette équation devient

$$\frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = \sigma_x^2 [E_y] - \sigma_x \sigma_y [E_x] - Q_{yx} [E_x] - Q_{yy} [E_y] - Q_{yz} [E_z]$$

soit en remplaçant  $[E_z]$  par son expression donnée par (4.28),

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} \frac{\partial [H'_x]}{\partial z} = & (-Q_{yx} + Q_{yz} Q_{zz}^{-1} Q_{zx} - \sigma_x \sigma_y) [E_x] \\ & + (-Q_{yy} + Q_{yz} Q_{zz}^{-1} Q_{zy} + \sigma_x^2) [E_y] \\ & - Q_{yz} Q_{zz}^{-1} \sigma_y [H'_x] + Q_{yz} Q_{zz}^{-1} \sigma_x [H'_y] \end{aligned} \quad (4.32)$$

En résumé, les quatre équations (4.30), (4.29), (4.32) et (4.31) s'écrivent sous forme matricielle,

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

avec

$$M = i \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\ M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \end{pmatrix}. \quad (4.34)$$

où les éléments de la matrices  $M$  sont définis par

$$\begin{aligned}
 M_{11} &= -\sigma_x Q_{zz}^{-1} Q_{zx} \\
 M_{12} &= -\sigma_x Q_{zz}^{-1} Q_{zy} \\
 M_{13} &= \sigma_x Q_{zz}^{-1} \sigma_y \\
 M_{14} &= \text{Id} - \sigma_x Q_{zz}^{-1} \sigma_x \\
 \\ 
 M_{21} &= -\sigma_y Q_{zz}^{-1} Q_{zx} \\
 M_{22} &= -\sigma_y Q_{zz}^{-1} Q_{zy} \\
 M_{23} &= -\text{Id} + \sigma_y Q_{zz}^{-1} \sigma_y \\
 M_{24} &= -\sigma_y Q_{zz}^{-1} \sigma_x \\
 \\ 
 M_{31} &= -\sigma_x \sigma_y - Q_{yx} + Q_{yz} Q_{zz}^{-1} Q_{zx} \\
 M_{32} &= \sigma_x^2 - Q_{yy} + Q_{yz} Q_{zz}^{-1} Q_{zy} \\
 M_{33} &= -Q_{yz} Q_{zz}^{-1} \sigma_y \\
 M_{34} &= Q_{yz} Q_{zz}^{-1} \sigma_x \\
 \\ 
 M_{41} &= -\sigma_y^2 + Q_{xx} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{zx} \\
 M_{42} &= \sigma_y \sigma_x + Q_{xy} - Q_{xz} Q_{zz}^{-1} Q_{zy} \\
 M_{43} &= Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma_y \\
 M_{44} &= -Q_{xz} Q_{zz}^{-1} \sigma_x
 \end{aligned}$$

### 3 Equations du champ dans le cas d'une structure invariante selon (Oz)

Dans le cas où la structure est invariante selon (Oz), le vecteur  $N$  est parallèle au plan (Oxy), ce qui permet certaines simplifications. La matrice  $Q$  devient

$$Q = \begin{pmatrix} \llbracket k^2 \rrbracket - \Delta \llbracket N_x N_x \rrbracket & -\Delta \llbracket N_x N_y \rrbracket & 0 \\ -\Delta \llbracket N_y N_x \rrbracket & \llbracket k^2 \rrbracket - \Delta \llbracket N_y N_y \rrbracket & 0 \\ 0 & 0 & \llbracket k^2 \rrbracket \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

et le système (4.34) se simplifie en

$$M = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_x \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma_y & \text{Id} - \sigma_x \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma_x \\ 0 & 0 & -\text{Id} + \sigma_y \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma_y & -\sigma_y \llbracket k^2 \rrbracket^{-1} \sigma_x \\ -\sigma_x \sigma_y - Q_{yx} & \sigma_x^2 - Q_{yy} & 0 & 0 \\ -\sigma_y^2 + Q_{xx} & \sigma_y \sigma_x + Q_{xy} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

## 4 Résolution des équations et expression de l'intensité

Les systèmes (4.33) ou (4.36) sont intégrés entre les deux extrémités,  $z = 0$  et  $z = h$ , de la zone modulée, afin d'obtenir la matrice  $P$ , telle que  $[F(h)] = P[F(0)]$ .

On utilise la méthode d'intégration matricielle (chap. 2-3) dans le cas général et l'algorithme basé sur la détermination des valeurs propres et vecteurs propres de la matrice  $M$  (chap. 2-2.3) dans le cas invariant selon ( $Oz$ ).

La matrice  $T$  est déduite de la matrice  $P$  par  $T = \Psi^{-1} P \Psi$ , où la matrice  $\Psi$  est définie de la même façon que pour le cas conique (eq. 3.24), à la différence près que les vecteurs portent maintenant sur les deux dimensions  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$ .

La matrice  $S$  est obtenue à partir des matrices  $T$ , à l'aide de l'algorithme du chapitre 2, et les composantes de Fourier des champs diffractés en transmission et réflexion sont obtenues par multiplication de la matrice  $S$  avec le vecteur champ incident.

Les intensités sont obtenues par les expressions en étendant aux deux dimensions les expressions données au chapitre 3-3.

## 5 Tests et validation

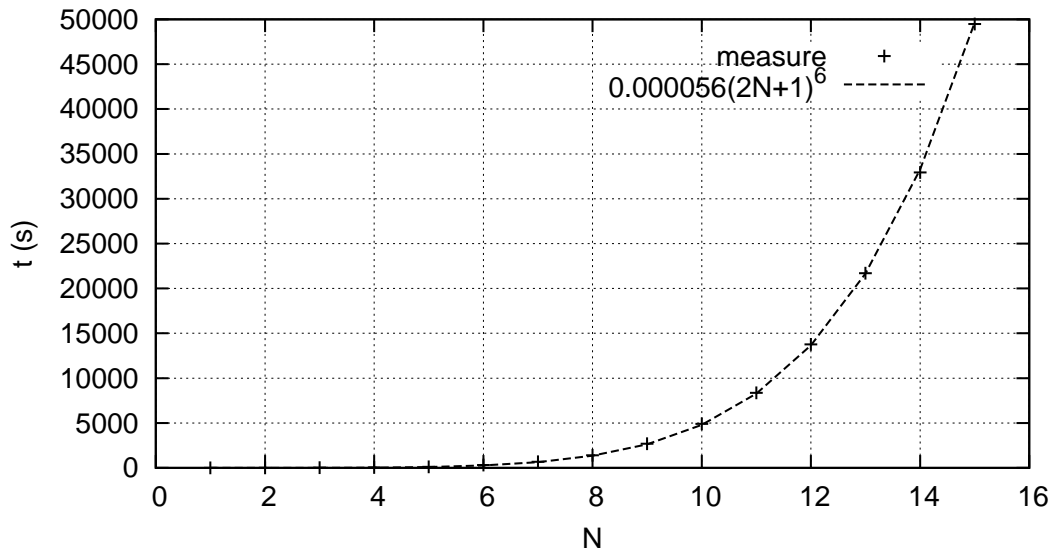
### 5.1 Durée du calcul

Les opérations les plus coûteuses en temps de calcul qu'utilise la méthode différentielle avec algorithme d'intégration matriciel, sont essentiellement des produits et inversions de matrices. Leur nombre est proportionnel au nombre de pas d'intégration.

Ces opérations requièrent un nombre d'opérations élémentaires à peu près proportionnel au cube du nombre de lignes ou colonnes de la matrice. Les matrices ayant un nombre de lignes (ou colonnes) multiple de  $(2N_x + 1)(2N_y + 1)$ , on s'attend à une durée de calcul proportionnelle à  $N^6$  si on considère que  $N_x = N_y = N$ . Cela correspond bien à ce qui est observé (Fig. 4.3).

N	t (s)	t (h)
1	3,57	0,001
2	4,96	0,001
3	11,5	0,003
4	38,4	0,01
5	114	0,03
6	290	0,08
7	670	0,19
8	1390	0,39
9	2690	0,75
10	4840	1,35
11	8270	2,30
12	13600	3,79
13	21500	5,96
14	32900	9,15
15	49300	13,7

**Tableau 4.1** Durées de calcul mesurées sur un processeur AMD Opteron à 1,8 GHz, en fonction de  $N = N_x = N_y$ , avec utilisation de l'algorithme matrices  $S$  avec 50 tranches et intégration par l'algorithme matriciel basé sur Runge et Kutta d'ordre 4 avec 50 pas d'intégration en tout.



**Figure 4.3** Durées du calcul en fonction de  $N = N_x = N_y$  dans les mêmes conditions que pour le tableau 4.1. La durée du calcul varie comme un un polynome d'ordre 6 en  $N$  (croix : durées mesurées ; trait en pointillés : interpolation).

	Ref. [50]	Ref. [40]	Ref. [51]	Ref. [52]	md3D
$e^r(-1, 0)$	0,00254	0,00207	0,00249	0,00246	0,0024572
$e^r(0, 0)$	0,01984	0,01928	0,01963	0,01951	0,0194816
$e^t(-1, -1)$	0,00092	0,00081	0,00086	0,00086	0,0008594
$e^t(0, -1)$	0,00704	0,00767	0,00677	0,00679	0,0067996
$e^t(-1, 0)$	0,00303	0,00370	0,00294	0,00294	0,0029403
$e^t(0, 0)$	0,96219	0,96316	0,96448	0,96472	0,9646619
$e^t(1, 0)$	0,00299	0,00332	0,00282	0,00280	0,0027998

**Tableau 4.2** Efficacités diffractées par un réseau diélectrique pyramidal. Comparaison de nos résultats, pour  $N = 15$ , avec ceux obtenus par : une méthode de transformation des coordonnées curvilignes (Ref. [50]), la méthode RCWA (Ref. [40]), la méthode ISS (Iterative Series Solution) (Ref. [51]) et la méthode de Chandezon (méthode particulière de transformation des coordonnées curvilignes) (Ref. [52]).

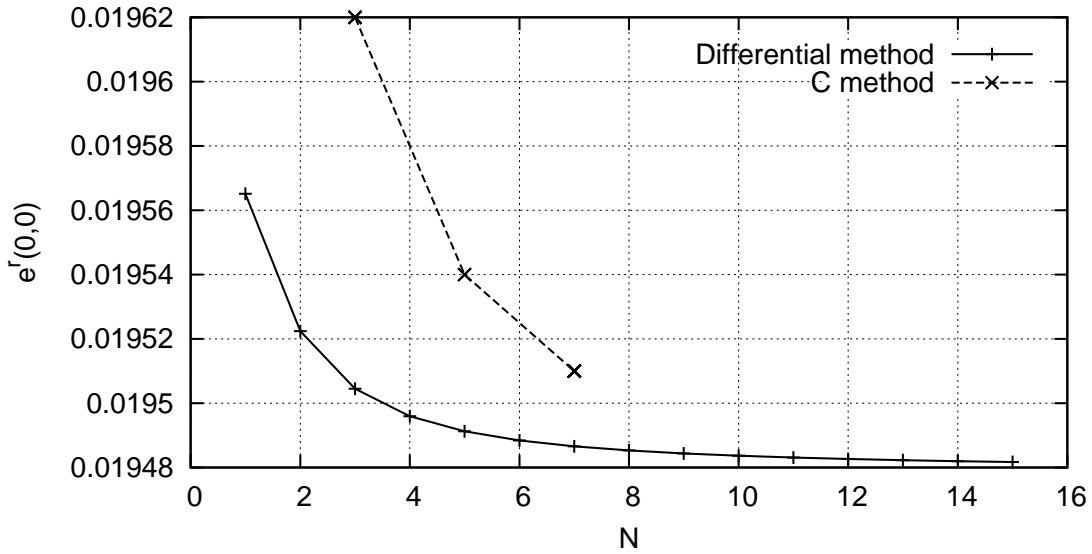
Notre programme, écrit en langage C, fait appel à la bibliothèque CBLAS (C Basic Linear Algebra Subprograms) [47] pour les produits matrice-matrice et matrice-vecteur, à la librairie LAPACK (Linear Algebra Package) [48] pour les inversions et les diagonalisations de matrices, à la librairie FFTW (Fastest Fourier Transform in the West) [49], développée au MIT, pour les transformées de Fourier rapides (FFT) mono et bidimensionnelles. La librairie ACML (AMD Core Math Library), qui comprend une optimisation des librairies BLAS et LAPACK pour les processeur AMD, est utilisée à la place de CBLAS et LAPACK lorsque le programme tourne sur une machine à base de processeurs AMD. Le choix des librairies utilisées se fait au moment de la compilation.

Ces bibliothèques sont gratuites et sont des références mondiales dans le domaine du calcul numérique. Leur utilisation garantit une plus grande précision, une plus grande stabilité et une plus grande rapidité que des algorithmes “faits maison”.

## 5.2 Structures diélectriques

Le tableau 4.2 présente les résultats obtenus par la méthode différentielle, comparés à ceux obtenus par quatre autres méthodes. La structure étudiée est un réseau bipériodique pyramidal, d'indice de réfraction  $\nu = 1,5$ , de hauteur  $h = 0,25$ , de périodes  $L_x = 1,5$  et  $L_y = 1$ , pour une longueur d'onde  $\lambda = 1,533$ , une incidence telle que  $\theta_i = 30^\circ$  et  $\phi_i = 45^\circ$  et une polarisation linéaire telle que  $\psi = 90^\circ$ .

Un bon accord est observé avec la méthode de Chandezon [52] et avec la méthode ISS (Iterative Series Solution) [51]. L'accord n'est qu'approximatif avec les résultats de Ref. [40], certainement en raison de la mauvaise convergence de la méthode RCWA pour ce type de structure, de même avec ceux de Ref. [50], probablement en raison de la limitation des capacités de calcul



**Figure 4.4** Convergence de l'efficacité de l'ordre (0,0) réfléchi en fonction de  $N$  pour un réseau pyramidal diélectrique avec  $\nu = 1,5$ ,  $h = 0,25$ ,  $L_x = 1,5$ ,  $L_y = 1$ ;  $\lambda = 1,533$ ,  $\theta_i = 30^\circ$ ;  $\phi_i = 45^\circ$  et  $\psi = 90^\circ$ . Comparaison avec les résultats obtenus à l'aide de la méthode de Chandezon [52].

disponibles à l'époque.

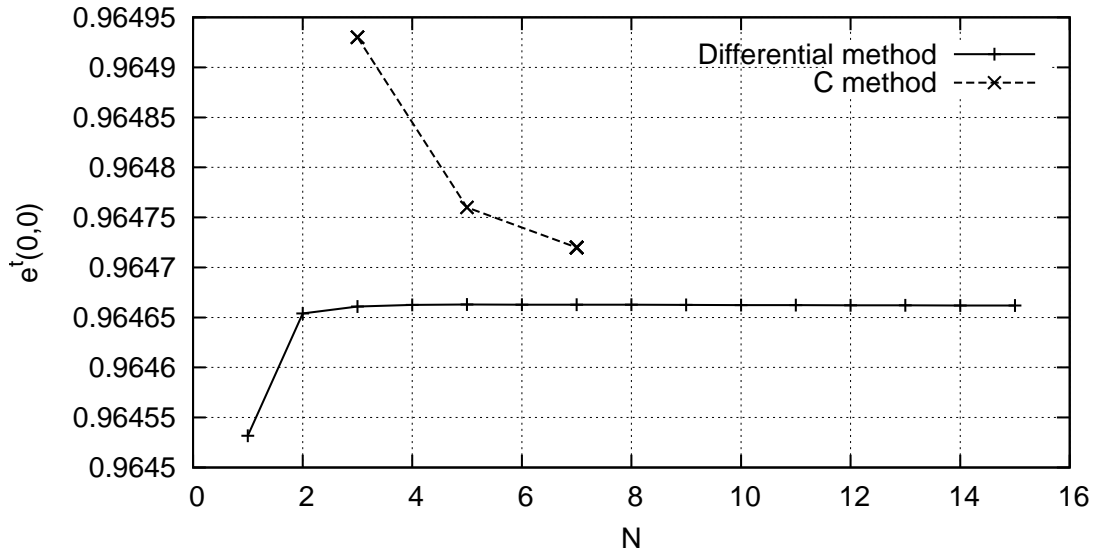
Les figures 4.4 et 4.5 et les tableaux 4.3 et 4.4 représentent la convergence en fonction de  $N$  des résultats issus de notre programme et de ceux issus de la méthode de Chandezon [52].

Les deux méthodes semblent converger vers des valeurs identiques, avec une convergence plus rapide pour la méthode différentielle.

Le tableau 4.5 présente les efficacités réfléchies par un réseau bipériodique sinusoïdal. Les résultats obtenus avec la méthode différentielle sont comparés avec ceux obtenus par la méthode de variation des interfaces (method of variations of boundaries). La surface du réseau est décrite par l'équation  $z(x, y) = h(\sin(2\pi x/L_x) + \sin(2\pi y/L_y))/4$ , avec  $h = 0,1\lambda$ ,  $L_y = L_x = \lambda/0,83$ . L'incidence est normale et la polarisation perpendiculaire au plan d'incidence ( $\psi = 0^\circ$ ).

Les résultats obtenus par les deux méthodes sont en accord.

En conclusion, nous pouvons dire que nos résultats sont en accord avec ceux de différentes méthodes, dans le cas de structures bipériodiques diélectriques. La méthode différentielle semble également plus précise et converger plus rapidement (cf. Fig. 4.4 et 4.5).



**Figure 4.5** Même chose que la figure 4.4 mais pour l'efficacité de l'ordre (0,0) transmis.

Par rapport aux méthodes auxquelles nous l'avons comparée, la méthode différentielle présente l'avantage de pouvoir traiter des structures plus complexes que celles définies par une interface unique ou un ensemble d'interfaces. Même si nous n'avons pas fait de comparaison dans le cas de ces structures complexes, faute de données disponibles, il n'y a pas de différence fondamentale dans la façon dont la méthode différentielle traite ce problème, par rapport au cas d'une interface simple. Notre programme devrait donc également donner des résultats corrects dans le cas de ces structures complexes, du moment que le champ de vecteur normal est correctement défini.

### 5.3 Structures métalliques

La figure 4.6, présente la convergence de l'efficacité de l'ordre (0,0) dans le cas d'un réseau sinusoïdal en aluminium d'indice de réfraction  $\nu = 1,3 + i7,1$  et de paramètres identiques au réseau du tableau 4.5 par ailleurs.

Pour montrer la différence avec les méthodes qui ne prennent pas en compte la normale réelle à la structure ([40, 5] par exemple), en plus du calcul normal, nous avons effectué des calculs avec le paramètre  $N$  arbitrairement fixé dans une direction arbitraire.

Dans le cas où la normale réelle est prise en compte, le calcul converge rapidement (écart relatif par rapport à la valeur obtenue pour  $N = 15$ , inférieur à  $10^{-3}$  à partir de  $N = 5$ ).

Dans le cas où le vecteur  $N$  est fixé parallèlement à  $(Ox)$ , la précision obtenue pour  $N = 15$  est inférieure à celle obtenue dans le cas normal pour  $N = 1$

Méthode différentielle		
N	r(0,-1)	r(0,0)
1	0,00246529	0,01956514
2	0,00245478	0,01952242
3	0,00245555	0,01950448
4	0,00245574	0,01949597
5	0,00245611	0,01949127
6	0,00245636	0,01948843
7	0,00245656	0,01948658
8	0,00245670	0,01948531
9	0,00245681	0,01948437
10	0,00245690	0,01948368
11	0,00245699	0,01948312
12	0,00245705	0,01948268
13	0,00245712	0,01948228
14	0,00245717	0,01948196
15	0,00245723	0,01948168
Méthode C		
N	r(0,-1)	r(0,0)
3	0,00246	0,01962
5	0,00246	0,01954
7	0,00246	0,01951

**Tableau 4.3** Convergence des efficacités réfléchies par un réseau pyramidal et comparaison avec la méthode de Chandezon [52].

(soit l'équivalent d'un facteur supérieur à  $10^6$  en temps de calcul). Le cas où  $N$  est fixé parallèlement à ( $Oz$ ) est meilleur, puisqu'en raison de la faible épaisseur de la structure, la normale réelle est proche de l'axe ( $Oz$ ).

Le tableau 4.6 présente des résultats pour un réseau cinq fois plus épais que celui de la figure 4.6.

La convergence est satisfaisante mais moins rapide que dans le cas précédent. Pour  $N = 5$ , on observe un écart relatif de 5,5%, par rapport à la valeur obtenue pour  $N = 15$ .

## 5.4 Structures invariantes selon ( $Oz$ )

La figure 4.7 et le tableau 4.7 présentent les résultats publiés par T. Schuster et al. [46], comparés aux nôtres. La structure est composée d'un réseau périodique de trous dans une couche d'indice  $\nu = 1,75 + i1,5$ , déposée sur un substrat de verre.

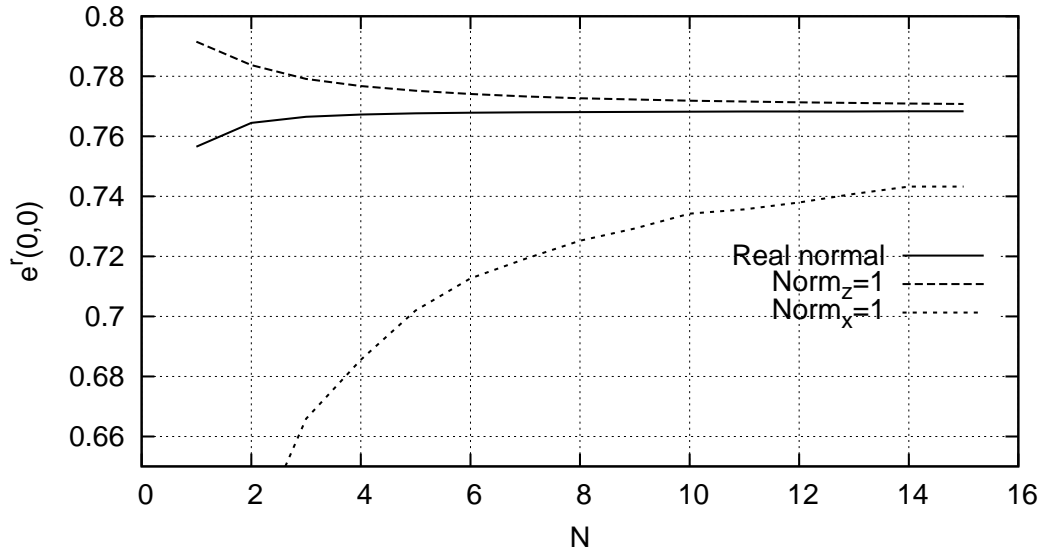


Méthode différentielle					
N	t(-1,-1)	t(-1,0)	t(0,-1)	t(0,0)	t(0,1)
1	0,000887050	0,00676080	0,00299439	0,9645318	0,00283796
2	0,000862642	0,00678129	0,00293683	0,9646539	0,00280525
3	0,000859840	0,00678797	0,00293685	0,9646609	0,00280078
4	0,000859449	0,00679145	0,00293785	0,9646626	0,00280011
5	0,000859425	0,00679380	0,00293855	0,9646629	0,00279990
6	0,000859400	0,00679532	0,00293904	0,9646628	0,00279983
7	0,000859399	0,00679640	0,00293937	0,9646628	0,00279980
8	0,000859405	0,00679717	0,00293959	0,9646627	0,00279979
9	0,000859413	0,00679776	0,00293977	0,9646626	0,00279979
10	0,000859422	0,00679822	0,00293992	0,9646624	0,00279980
11	0,000859412	0,00679859	0,00294003	0,9646624	0,00279979
12	0,000859435	0,00679893	0,00294011	0,9646622	0,00279981
13	0,000859443	0,00679923	0,00294020	0,9646621	0,00279983
14	0,000859444	0,00679946	0,00294027	0,9646620	0,00279984
15	0,000859456	0,00679969	0,00294033	0,9646619	0,00279985
Méthode C					
N	t(-1,-1)	t(-1,0)	t(0,-1)	t(0,0)	t(0,1)
3	0,00085	0,00678	0,00292	0,96493	0,00282
5	0,00086	0,00679	0,00294	0,96476	0,00281
7	0,00086	0,00679	0,00294	0,96472	0,00280

**Tableau 4.4** Convergence des efficacités transmises par un réseau pyramidal et comparaison avec la méthode de Chandezon [52].

	Différentielle	Var. bound.
e(-1,0)	0,00327759	0,0032774
e(0,-1)	0,00372975	0,0037296
e(0,0)	0,09627385	0,0962746

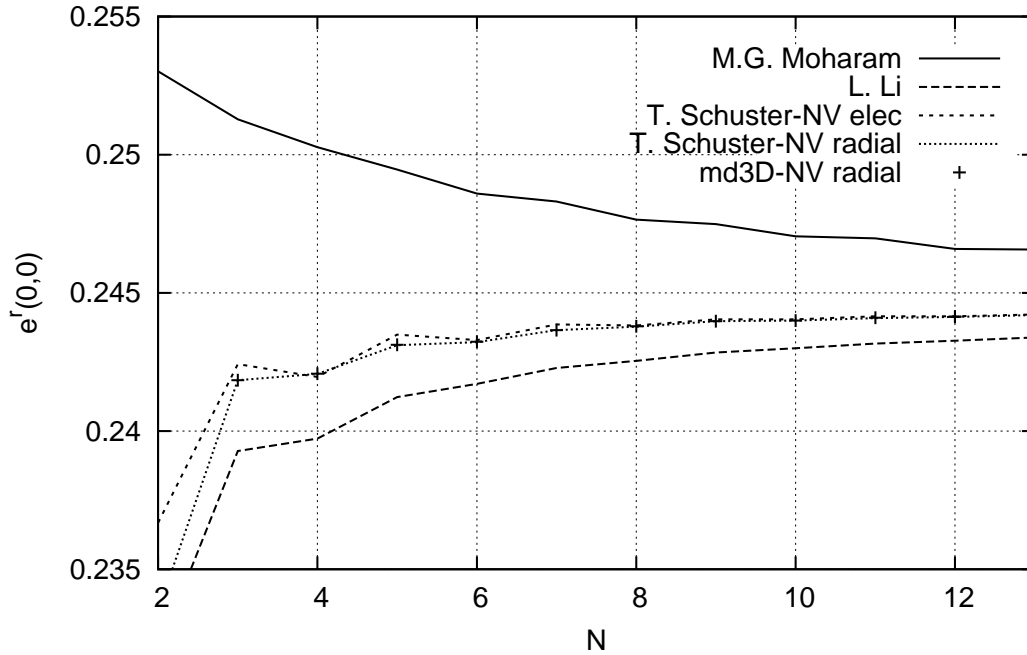
**Tableau 4.5** Comparaison entre la méthode différentielle et la méthode de variation des interfaces (method of variations of boundaries) [53] dans le cas d'un réseau bipériodique sinusoïdal avec  $\nu = 2$ ,  $\lambda/L_x = 0,83$ ,  $h = 0,1\lambda$ ,  $L_y = L_x$ ,  $\theta_i = \phi_i = 0^\circ$ ,  $\psi = 0^\circ$ . Paramètres numériques pour la méthode différentielle :  $N = 15$ ,  $N_S = 50$ .



**Figure 4.6** Effet de la prise en compte de la normale sur la convergence des calculs. Courbe en trait plein : convergence de l'efficacité dans l'ordre (0,0) pour un réseau sinusoïdal en aluminium ( $\nu = 1,3 + i7,1$ ) et de paramètres géométriques identiques à ceux du tableau 4.5. Courbes en pointillés : même chose en fixant arbitrairement le vecteur  $N$  parallèlement à  $(Oz)$  ou parallèlement à  $(Ox)$ .

N	$e(-1,0)$	$e(0,-1)$	$e(0,0)$
0			0,70686
1	0,26007	0,41886	0,36104
2	0,17128	0,24908	0,16926
3	0,12093	0,21728	0,11574
4	0,12148	0,21464	0,11857
5	0,12302	0,21703	0,12151
6	0,12398	0,21958	0,12384
7	0,12454	0,22127	0,12537
8	0,12510	0,22231	0,12648
9	0,12578	0,22292	0,12746
10	0,12623	0,22330	0,12804
11	0,12650	0,22371	0,12840
12	0,12659	0,22399	0,12857
13	0,12660	0,22415	0,12858
14	0,12665	0,22428	0,12868
15	0,12669	0,22441	0,12858

**Tableau 4.6** Efficacités réfléchies par un réseau bipériodique en aluminium  $\nu = 1,3 + i7,1$ ,  $h = 0,5\lambda$ ,  $L_y = L_x = 0,83\lambda$ ,  $\theta_i = \phi_i = 0^\circ$ ,  $\psi = 0^\circ$ . Paramètres numériques pour la méthode différentielle :  $N_S = 250$ ,  $N_x = N_y = N$ .



**Figure 4.7** Convergence de l'ordre (0,0) réfléchi par un réseau de trous circulaires creusés dans un matériau d'indice  $1,75 + i1,5$ , d'épaisseur  $h = 50$  nm et déposé sur un substrat de verre d'indice 1,5. Les résultats obtenus par notre programme sont comparés avec ceux obtenus par T. Schuster et al. [46], ceux que l'on obtient en utilisant les algorithmes de M. G. Moharam et al. [36, 54] et de L. Li [5] (données fournies par l'auteur principal de [46] et présentées avec son autorisation). Nous avons utilisé le champ de vecteur normal présenté figure 4.2-b, les résultats obtenus par T. Schuster et al. correspondent aux champs de vecteur normal présenté figure 4.2-a et b. Le réseau étudié possède les périodes  $L_x = L_y = 1000$  nm, un diamètre de trous de 500 nm, est éclairé en incidence normale par une lumière de longueur d'onde 500 nm et de polarisation  $\psi = 45^\circ$ .

Nos résultats et ceux de T. Schuster sont en parfait accord. Les résultats obtenus par les formulations de L. Li [5] et de M. G. Moharam [36, 54], sont également présentés et mettent en évidence la meilleure convergence dans le cas où la normale est correctement prise en compte.

N	M. G. Mohar- am	L. Li	Schuster NV elec	Schuster NV ra- dial	md3D NV radial
0	0,29035	0,22100	0,23331	0,22413	0,22413
1	0,25966	0,23507	0,24245	0,24281	0,24281
2	0,25302	0,23200	0,23668	0,23351	0,23350
3	0,25128	0,23928	0,24242	0,24184	0,24184
4	0,25027	0,23973	0,24196	0,24207	0,24208
5	0,24946	0,24123	0,24349	0,24311	0,24312
6	0,24859	0,24171	0,24329	0,24322	0,24323
7	0,24831	0,24228	0,24386	0,24365	0,24365
8	0,24765	0,24254	0,24382	0,24378	0,24379
9	0,24749	0,24284	0,24404	0,24398	0,24398
10	0,24705	0,24300	0,24404	0,24400	0,24400
11	0,24697	0,24317	0,24415	0,24409	0,24410
12	0,24659	0,24327	0,24415	0,24413	0,24414

**Tableau 4.7** Même calcul que Fig. 4.7. Les résultats obtenus par notre programme et ceux obtenus par T. Schuster sont quasi identiques.



Deuxième partie

## **Applications**



# Chapitre 1

## Diffusions surfacique et volumique

Ce premier chapitre est consacré à l'étude du champ diffusé par des surfaces rugueuses et par des échantillons inhomogènes en volume.

La possibilité de caractériser l'origine surfacique ou volumique de la diffusion, à partir des propriétés du champ diffusé, est un problème important qui a retenu l'attention de la communauté depuis plusieurs années [55].

De façon générale, il est important de pouvoir reconnaître de façon directe, c'est à dire indépendamment de l'aspect *reconstruction électromagnétique*, une diffusion de surface ou une diffusion de volume, résultant d'une distribution d'objets corrélés ou décorrélés, ou encore de détecter la présence d'un objet enfoui [56], voire de préciser la position verticale d'un objet diffusant au sein d'une scène.

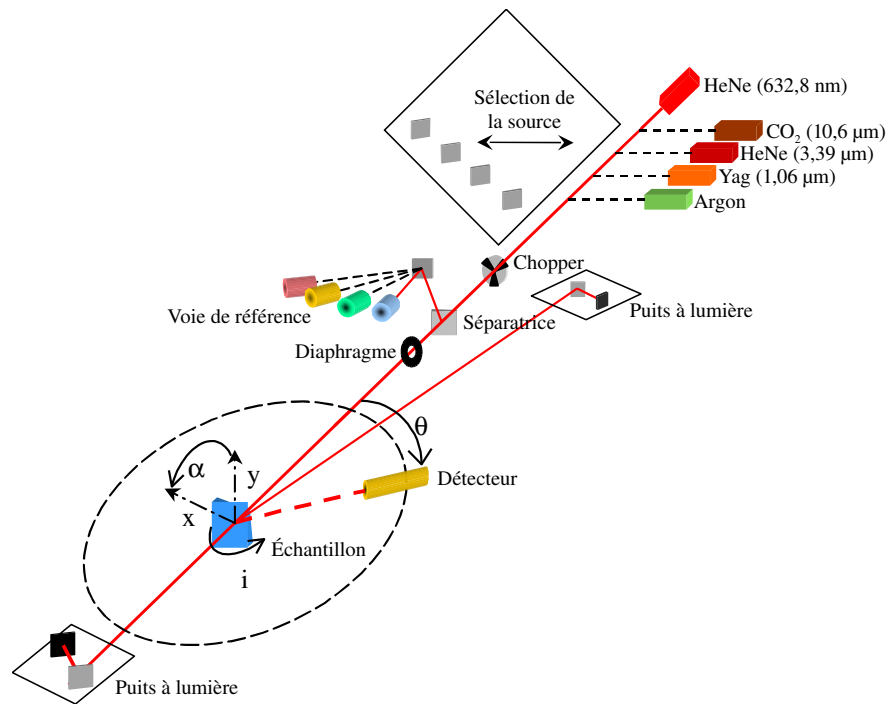
Parmi les méthodes déjà proposées, on citera de façon non exhaustive les explorations en fonction de la longueur d'onde [57, 58, 55], l'utilisation de l'effet *antidiffusant* [59] ou encore l'introduction de la polarisation [60].

Plus récemment, grâce aux techniques d'ellipsométrie sur lumière diffuse, il a été montré au sein de l'équipe MAP2 de l'institut Fresnel que la mesure angulaire du déphasage polarimétrique de l'onde diffusée fournissait une signature clé pour la séparation des diffusions de surface et de volume [61, 9]. Pour les faibles diffusions, ces résultats ont été démontrés théoriquement à l'aide de modèles perturbatifs et confirmés par les mesures. Pour les fortes diffusions, les mesures ont montré [62] que le déphasage polarimétrique constituait également une signature de l'origine surfacique ou volumique ; l'analyse théorique de ces résultats [10] est présentée dans ce chapitre.

L'étude du déphasage polarimétrique permet également d'aller au delà de la discrimination surface/volume, en particulier si on s'intéresse aux variations rapides de ce déphasage, à l'échelle angulaire du grain de speckle. Nous montrons par exemple comment l'analyse du déphasage polarimétrique du champ diffusé peut s'appliquer à la caractérisation de membranes de filtration.

De façon plus générale, on trouvera dans ce chapitre une confrontation de





**Figure 1.1** Schéma du diffusomètre (seul le déplacement du détecteur selon  $\theta$  est représenté).

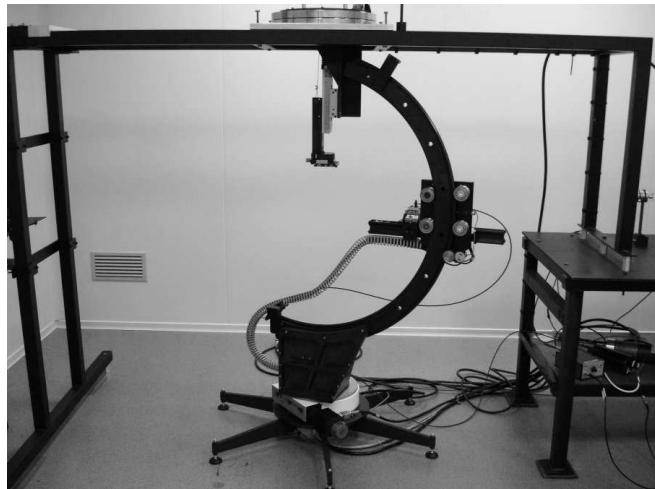
nos calculs à des mesures effectuées sur l'instrument du laboratoire.

## 1 Mesure ellipsométrique du champ diffracté ou diffusé

Pour commencer, nous présentons brièvement l'outil expérimental ayant permis la réalisation des mesures de champ diffusé ou diffracté présentées dans ce chapitre et dans le reste de cette partie.

### 1.1 Description du banc de mesure

Le schéma de principe du banc de mesure est représenté figure 1.1. La lumière diffusée par l'échantillon est mesurée à l'aide d'un détecteur placé sur un bras de mesure motorisé. Le bras de mesure (Fig. 1.2) peut se déplacer sur la sphère de diffusion selon deux axes de rotation correspondant aux angles  $\theta$  et  $\phi$ . L'échantillon est éclairé par un laser dont la direction est fixe. L'ajustement de l'angle d'incidence est effectué par la rotation du porte échantillon, à l'aide d'une platine motorisée. La position de l'échantillon peut-être réglée grâce à des platines de translation motorisées qui permettent également de réaliser



**Figure 1.2** Photographie du dispositif de déplacement du détecteur. Le détecteur (ou la fibre optique reliée au détecteur) est placé sur un bras situé sur une platine motorisée pouvant se déplacer le long d'un arceau. L'arceau, dont le centre correspond à la position de l'échantillon, est placé sur une platine de rotation. La distance entre le détecteur et l'échantillon est réglable de quelques centimètres à environ 1 m. (Le porte échantillon n'est pas présent sur la photo).

des mesures cartographiques de l'échantillon. Plusieurs sources laser sont disponibles permettant de couvrir des longueurs d'ondes allant du proche UV (350 nm) à l'infrarouge (10,6  $\mu\text{m}$ ). Le détecteur (photo-diode, photo-diode avalanche ou photomultiplicateur, selon la longueur d'onde et le niveau d'intensité diffusé) est généralement placé à l'extrémité d'une fibre optique de 1 mm de diamètre qui récolte le signal.

Afin d'augmenter le rapport signal sur bruit et ainsi de permettre la détection de faibles niveaux de diffusion, le signal est traité par une détection synchrone. La modulation du faisceau incident est obtenue par un hacheur mécanique (*chopper*) ou par un modulateur acousto-optique.

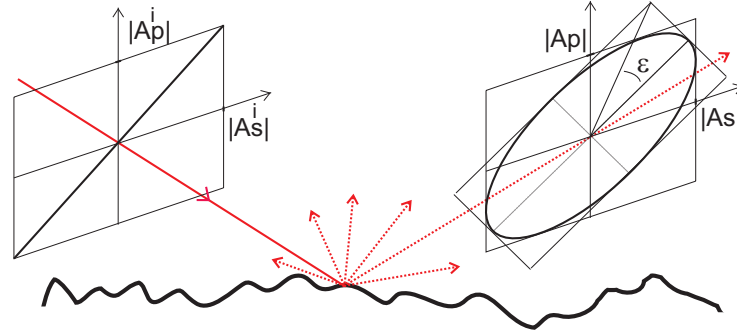
Une partie du faisceau incident est envoyé sur un détecteur de référence à l'aide d'une lame séparatrice afin de pouvoir corriger le signal des variations d'intensité de la source.

L'ensemble est situé dans une salle blanche de classe 100 000, afin d'éviter la lumière parasite pouvant résulter de la diffusion par des poussières en suspension.

## 1.2 Mesure ellipsométrique du champ

L'ellipsométrie est la technique qui permet de caractériser l'état de polarisation du champ.

La mesure ellipsométrique du champ diffusé a essentiellement été déve-



**Figure 1.3** Polarisation du champ diffusé. Le déphasage polarimétrique  $\delta$  est lié à l'ellipticité ( $\epsilon$ ) de la polarisation.

loppée dans notre équipe durant les thèses de C. Deumié [61] et de O. Gilbert [63], auxquelles on pourra se référer pour une description approfondie.

### Paramètres ellipsométriques du champ

On considère ici que le champ est parfaitement polarisé, autrement dit qu'il n'y a aucun effet de moyenne spatiale ou temporelle sur plusieurs états de polarisation.

Le champ mesuré dans la direction  $k$  s'écrit

$$E(\mathbf{r}, t) = (A_s + A_p)e^{i(kr - \omega t)} \quad (1.1)$$

où  $A_s$  et  $A_p$  sont les composantes selon les directions de polarisation  $s$  et  $p$ , telles que

$$A_s = |A_s|e^{i\delta_s} \mathbf{s} \quad (1.2)$$

$$A_p = |A_p|e^{i\delta_p} \mathbf{p}. \quad (1.3)$$

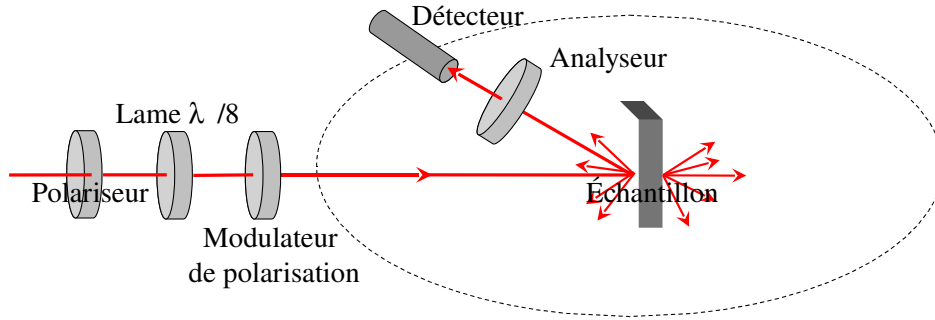
Le champ décrit donc au cours du temps une ellipse (Fig. 1.3) qui peut être caractérisée par les amplitudes  $|A_s|$  et  $|A_p|$  et par le déphasage polarimétrique

$$\delta = \delta_p - \delta_s. \quad (1.4)$$

### Mesure ellipsométrique à l'aide d'un modulateur de polarisation

La mesure du déphasage polarimétrique et de  $|A_s||A_p|$  est réalisée à l'aide du montage décrit figure 1.4. Ce montage utilise un modulateur acousto-optique qui induit un retard de phase périodique  $\delta_M(t)$  sur le faisceau :

$$\delta_M(t) = \Delta_0 (G) \sin(\Omega t) + \alpha_M, \quad (1.5)$$



**Figure 1.4** Schéma de principe de la mesure ellipsométrique du champ diffusé.

où  $\Delta_0 (G)$  est l'amplitude de modulation qui dépend du gain  $G$  du modulateur et où  $\alpha_M$  est la biréfringence résiduelle du modulateur. La fréquence de modulation,  $\Omega/2\pi$ , qui correspond à une fréquence de résonance du cristal, est de l'ordre de 50 kHz.

Une lame  $\lambda/8$ , dont le rôle est d'améliorer la sensibilité du dispositif pour les valeurs du déphasage proches de  $0^\circ$ , est ajoutée au modulateur. L'ensemble constitué de la lame retardatrice, du modulateur et de l'échantillon est compris entre un polariseur et un analyseur croisés, orientés à  $45^\circ$  de la direction  $s$ .

L'intensité mesurée après ce dispositif est modulée à la pulsation  $\Omega$  et on peut l'écrire à l'aide de son développement harmonique

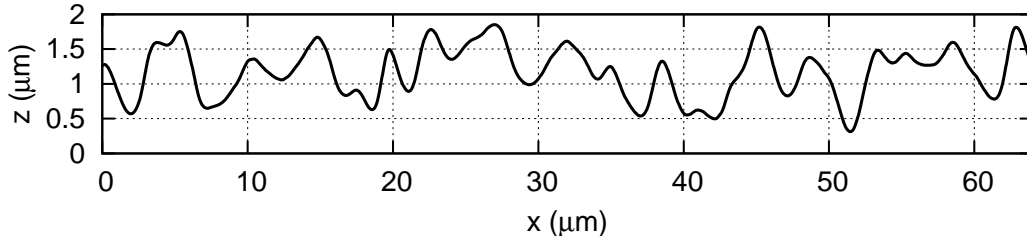
$$\frac{I}{I_0} = I_c + I_\Omega \sin(\Omega t) + I_{2\Omega} \cos(2\Omega t) + \dots \quad (1.6)$$

où  $I_0$  est l'intensité après le polariseur et où les termes  $I_c$ ,  $I_\Omega$  et  $I_{2\Omega}$  sont donnés par

$$\begin{aligned} I_c &= \frac{T_L}{4} \left[ |A_s|^2 + |A_p|^2 + 2|A_s A_p| J_0(\Delta_0(G)) \cos(\delta + \delta_L + \alpha_M) \right] \\ I_\Omega &= J_1(\Delta_0(G)) T_L |A_s A_p| \sin(\delta + \delta_L + \alpha_M) \\ I_{2\Omega} &= J_2(\Delta_0(G)) T_L |A_s A_p| \cos(\delta + \delta_L + \alpha_M), \end{aligned}$$

avec  $J_i$  la fonction de Bessel d'ordre  $i$  et  $T_L$  le facteur de transmission de la lame retardatrice.

Après un étalonnage adéquat décrit dans ref. [63], la détection synchrone mesure les termes  $I_\Omega$  et  $I_{2\Omega}$ , desquels on peut déduire  $\delta$  et  $|A_s||A_p|$ .



**Figure 1.5** Exemple de profil de surface rugueuse (extrait d'une mesure AFM).

## 2 Description des structures diffusantes

### 2.1 Surfaces rugueuses

Dans le cas d'une surface rugueuse, la structure diffusante est définie par les coordonnées de l'interface et par la valeur des indices de réfraction du substrat et du superstrat.

Les coordonnées de l'interface doivent être définies par une application faisant correspondre une hauteur  $z$  unique à chaque couple  $(x, y)$  dans le cas général, ou à chaque  $x$  dans le cas d'une structure invariante selon  $y$ .

Le cas où l'interface ne peut être définie par une application (surface paramétrique) se traite également par la méthode différentielle (cf. paragraphe 4.3). Ce cas se rapproche par certains aspects de la diffusion de volume et ne sera pas considéré, à proprement parler, comme de la diffusion *de surface*.

La figure 1.5 montre un exemple de surface rugueuse, définie par une interface du type  $z = f(x)$ .

On définit la *rugosité quadratique*,  $R_q$ , de l'interface par

$$R_q^2 = \frac{1}{S} \int_S h^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.7)$$

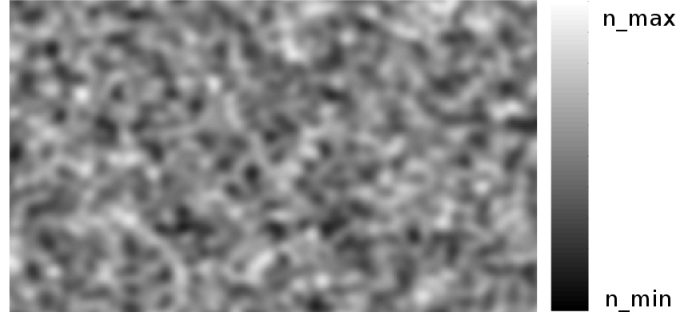
avec  $\mathbf{r} = (x, y)$ , pour une surface à deux dimensions ; ce qui revient dans le cas d'une surface invariante selon  $y$  à

$$R_q^2 = \frac{1}{L} \int_x h^2(x) dx. \quad (1.8)$$

On utilise également, la *longueur de corrélation* définie comme la largeur à mi-hauteur de la fonction d'autocorrélation  $\Gamma(\mathbf{r})$  du profil de l'interface,

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{S} \int_S h(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}' + \mathbf{r}) d\mathbf{r}'. \quad (1.9)$$

La pente  $w$  de la surface rugueuse est définie comme la racine de la valeur quadratique moyenne de la dérivée de la hauteur de la surface, soit, pour une



**Figure 1.6** Exemple de cartographie d'indice définissant une structure hétérogène en volume (structure invariante selon  $y$ ).

surface 2D

$$w^2 = \frac{1}{S} \int_S |\mathbf{grad}(h(\mathbf{r}))|^2 d\mathbf{r}. \quad (1.10)$$

Notons que l'ordre de grandeur de la pente peut également être obtenu en divisant la rugosité par la longueur de corrélation.

## 2.2 Volumes hétérogènes

La structure diffusante est définie par la valeur de son indice de réfraction en tout point de la zone modulée. La figure 1.6 présente un exemple de structure diffusante hétérogène en volume. Cette zone modulée est, en général, séparée du substrat et du superstrat par deux interfaces planes comprises dans le plan ( $Oxy$ ).

Pour des structures tridimensionnelles, on définit l'*inhomogénéité relative*,  $I_q$ , de l'indice de réfraction par

$$I_q^2 = \frac{1}{V} \int_V \left| \frac{\Delta v}{v}(\boldsymbol{\rho}) \right|^2 d\boldsymbol{\rho}, \quad (1.11)$$

avec  $\boldsymbol{\rho} = (x, y, z)$ ,  $V$  le volume de la zone modulée et  $v$  l'indice de réfraction.

Dans le cas de structures invariantes selon  $y$ , l'inhomogénéité relative se réduit à

$$I_q^2 = \frac{1}{S} \int_S \left| \frac{\Delta v}{v}(x, z) \right|^2 dx dz, \quad (1.12)$$

où  $S$  est la surface de la section, perpendiculairement à  $y$ , de la zone modulée.

On définit également la longueur de corrélation, comme la largeur à mi-hauteur de la fonction d'autocorrélation de l'indice de réfraction.

### 3 Intensité de la lumière diffusée

#### 3.1 Diffusion par une surface rugueuse

Notre équipe possède depuis plusieurs années une expertise dans l'étude expérimentale et théorique de la diffusion par des surfaces peu rugueuses ( $R_q \ll \lambda$ ). Sur le plan expérimental, cette étude est autorisée par la présence de détecteurs sensibles à des très faibles flux (photomultiplicateurs et photodiodes avalanche) et à l'utilisation de détecteurs synchrones dans la chaîne d'acquisition. Au niveau théorique, le comportement de la lumière diffusée par ces surfaces est parfaitement prédit par la théorie du premier ordre, aussi bien pour des interfaces simples que pour des multicouches. Ces études ont fait l'objet de nombreuses publications et de plusieurs thèses de doctorat [61, 63, 64].

Les surfaces de forte rugosité, pour lesquelles le comportement de la lumière diffusée est plus complexe font également l'objet d'études expérimentales dans notre équipe ; leur étude théorique requiert une modélisation adaptée.

Nous présentons dans ce paragraphe quelques résultats obtenus par la méthode différentielle, essentiellement pour des surfaces de forte rugosité.

#### Intensité de la lumière diffusée en fonction de la rugosité

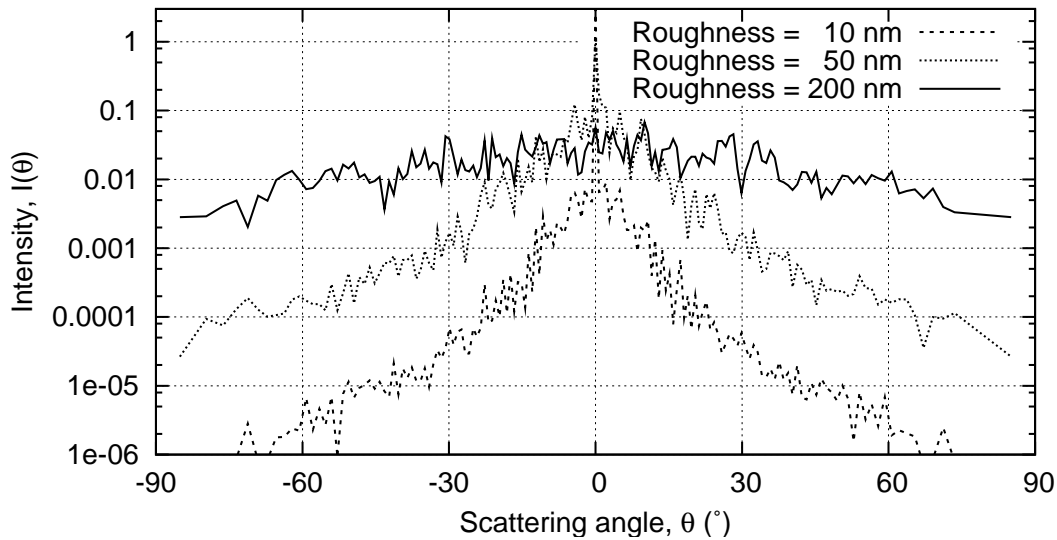
La figure (1.7) présente les intensités de la lumière diffusée, par des surfaces diélectriques de différentes rugosités. Ces intensités sont calculées par la méthode différentielle et tracées en fonction de l'angle de diffusion.

Dans le cas d'une surface peu rugueuse et de pente faible, l'intensité de la lumière est concentrée dans le spéculaire. La lumière diffusée est de faible intensité et se trouve essentiellement au voisinage du spéculaire (Fig. 1.7,  $R_q = 10$  nm). Lorsque la rugosité augmente, l'intensité de la lumière diffusée s'accroît et devient moins localisée (Fig. 1.7,  $R_q = 50$  nm), puis, lorsque la rugosité devient de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde (Fig. 1.7,  $R_q = 200$  nm), la totalité de la lumière est diffusée (plus de spéculaire) d'une façon largement étendue angulairement.

Ces résultats sont qualitativement en accord, à la fois avec ceux issus de la théorie de la diffusion au premier ordre [65] pour les surfaces peu rugueuses et avec les résultats expérimentaux obtenus dans l'équipe [62, 63], dans le cas de fortes rugosités.

#### Comparaison entre mesures et simulations dans le cas de surfaces très rugueuses

D'un point de vue plus quantitatif, nous comparons ici, le calcul de l'intensité diffusée, obtenu par la méthode différentielle, avec des mesures effectuées



**Figure 1.7** Calcul de l'intensité de la lumière diffusée par trois surface de rugosités croissantes. La longueur d'onde est  $\lambda = 632,8$  nm, l'angle d'incidence  $\theta_i = 0^\circ$ , l'indice de réfraction  $\nu = 1,5$ .

sur une surface très rugueuse, à l'aide du banc présenté en début de chapitre.

L'échantillon est constitué de résine déposée sur un substrat de verre. La surface, qui a été préalablement mesurée par microscopie à force atomique (AFM), possède une rugosité  $R_q = 0,3 \mu\text{m}$  et une longueur de corrélation de  $1,4 \mu\text{m}$ . La surface est éclairée par un laser He-Ne ( $\lambda = 0,633 \mu\text{m}$ ) pour plusieurs angles d'incidence et plusieurs polarisations.

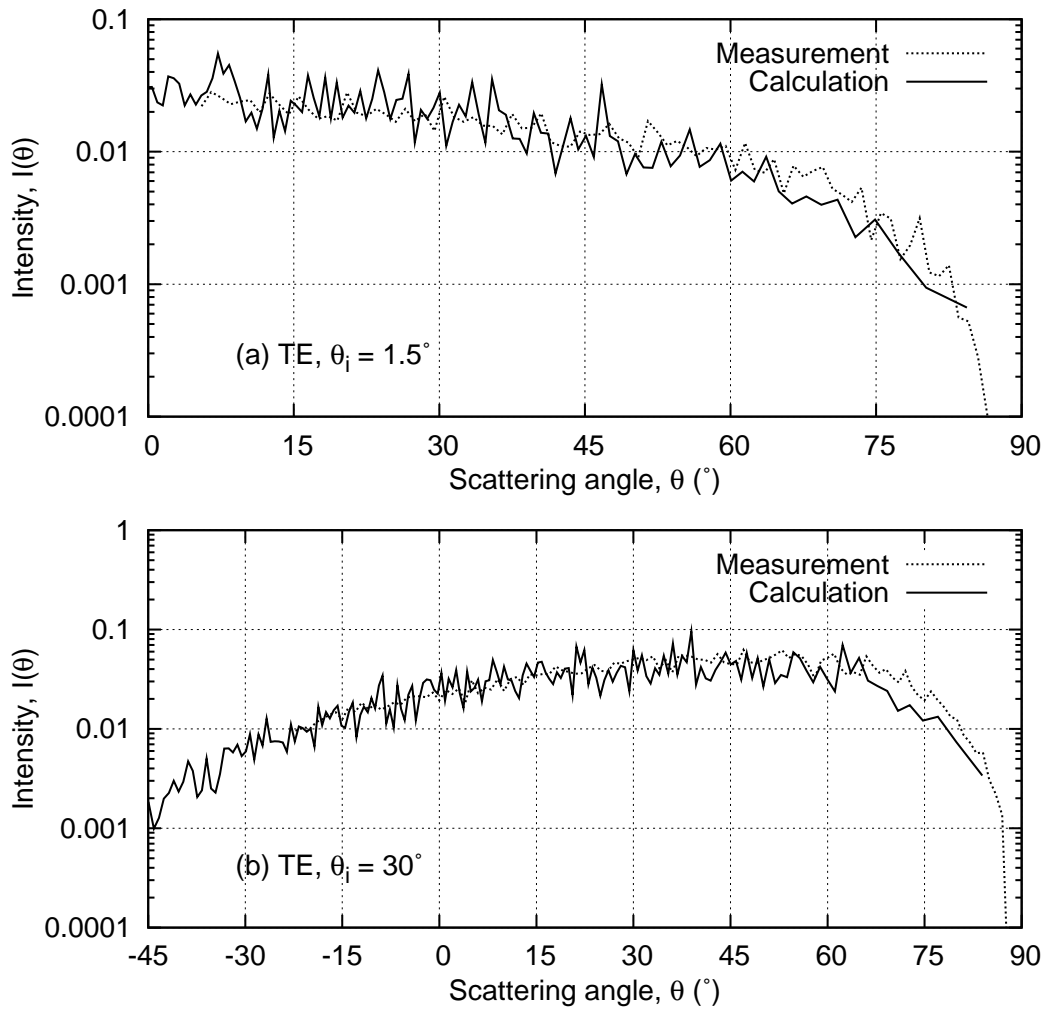
Pour les simulations, le code considérant une structure invariante selon une dimension est utilisé<sup>1</sup>. Chaque courbe est obtenue en effectuant la moyenne sur 10 calculs, correspondant chacun à une ligne du fichier AFM. L'indice de réfraction de la résine est considéré égal à 1,5.

La figure 1.8 présente les mesures et les simulations de l'intensité diffusée dans le cas d'une polarisation s (ou TE) et pour des angles d'incidence de  $1,5^\circ$  et  $30^\circ$ . La figure 1.9 présente les résultats pour une polarisation p (ou TM) et des angles d'incidence de  $1,5^\circ$  et  $60^\circ$ .

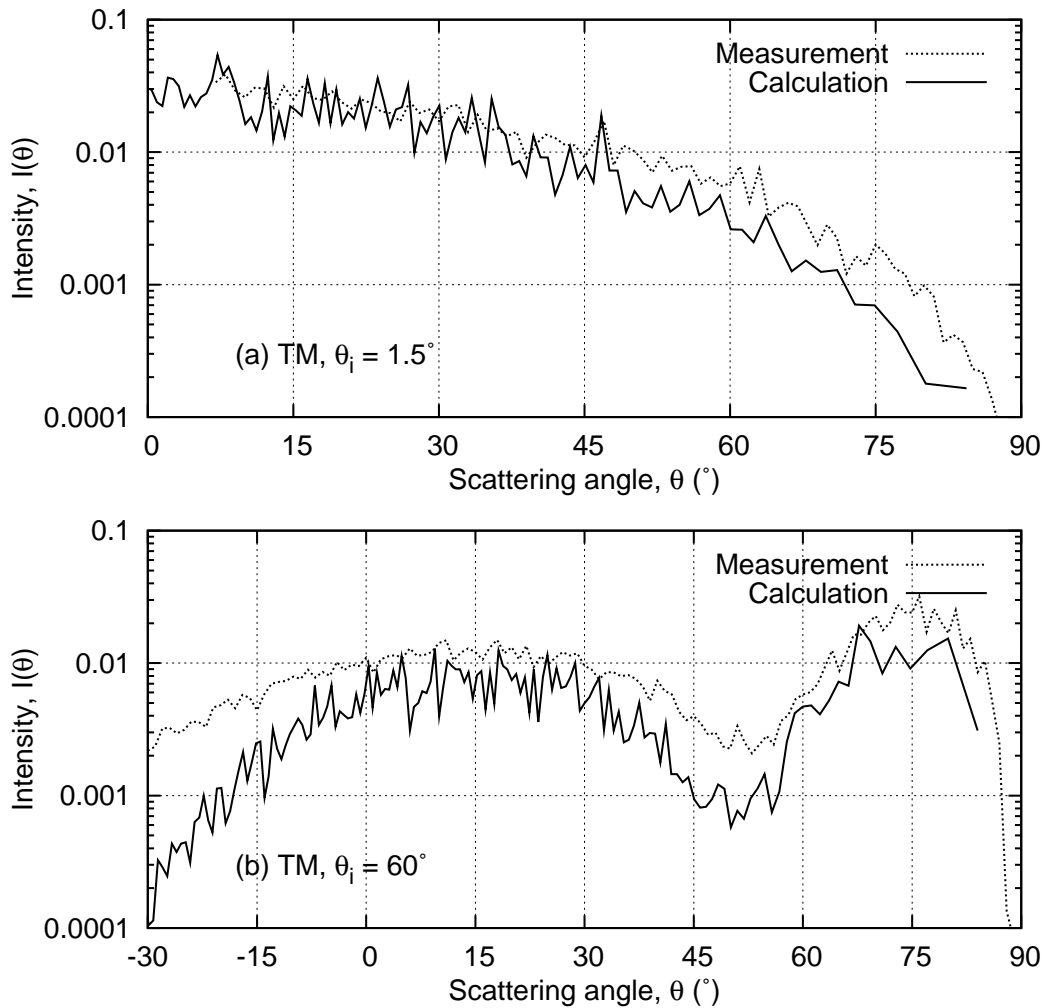
L'accord entre mesures et simulations est très satisfaisant en polarisation s et l'intensité calculée est un peu inférieure à celle mesurée en polarisation p, surtout pour l'incidence de  $60^\circ$ . Notons que comme nous n'avons pas pris en compte l'interface de sortie (peu rugueuse) dans nos simulations il est normal que nous obtenions une intensité inférieure à la mesure. Il est également normal que ce phénomène soit le plus gênant en polarisation p au voisinage

<sup>1</sup>Le code tridimensionnel n'était pas disponible à l'époque de cette étude.





**Figure 1.8** Mesure et simulation de l'intensité de la lumière diffusée (en réflexion) par un échantillon de résine dont la surface a une rugosité de  $0,3 \mu\text{m}$  et une longueur de corrélation de  $1,4 \mu\text{m}$ . La longueur d'onde est  $0,633 \mu\text{m}$ , la polarisation s (TE) et l'angle d'incidence  $1,5^\circ$  et  $30^\circ$ . Les résultats théoriques sont obtenus par la moyenne des intensités calculées pour 10 lignes différentes.

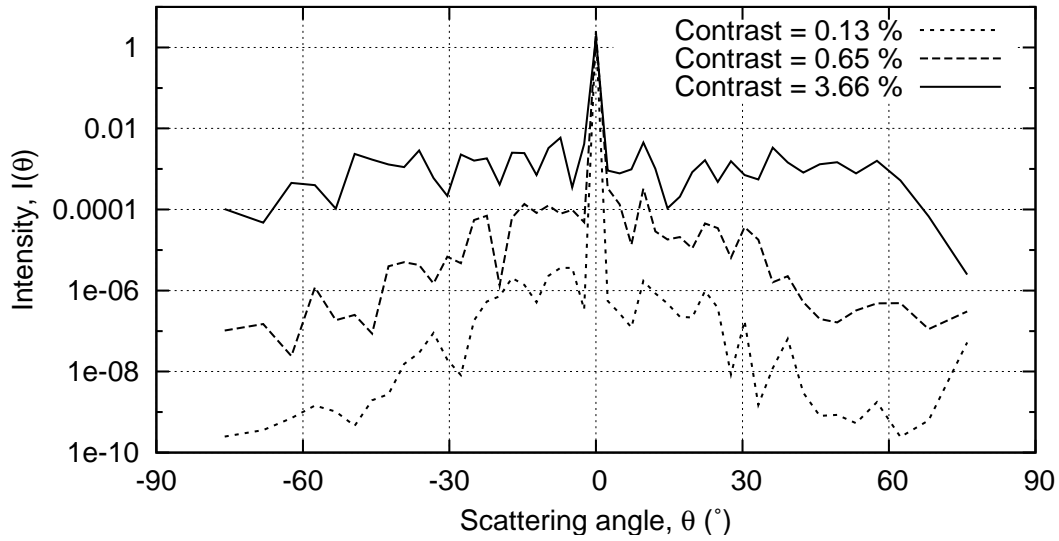


**Figure 1.9** Même chose que Fig. 1.8, en polarisation p (TM) et pour un angle d'incidence de  $1,5^\circ$  et  $60^\circ$ .

de l'angle de Brewster, la lumière diffusée par la première interface étant plus faible dans ces conditions et la lumière transmise étant plus forte. Notons aussi que l'indice de réfraction de la résine n'est pas connu parfaitement et que nous avons négligé l'absorption.

Pour l'angle d'incidence de  $60^\circ$  en polarisation p, on observe expérimentalement un creux dans l'intensité diffusée autour de  $\theta = 50^\circ$ . Ce phénomène, qui peut être interprété comme un effet de pseudo-Brewster est correctement restitué par les simulations.

Globalement ces résultats sont satisfaisants et montrent la capacité de la méthode différentielle à modéliser correctement la diffusion par des surfaces très rugueuses.



**Figure 1.10** Intensité de la lumière diffusée par des structures hétérogènes pour différentes inhomogénéités d'indice (ou contraste d'indice).

### 3.2 Diffusion par un volume hétérogène

La diffusion par un volume hétérogène est illustrée figure 1.10 pour plusieurs inhomogénéités d'indice.

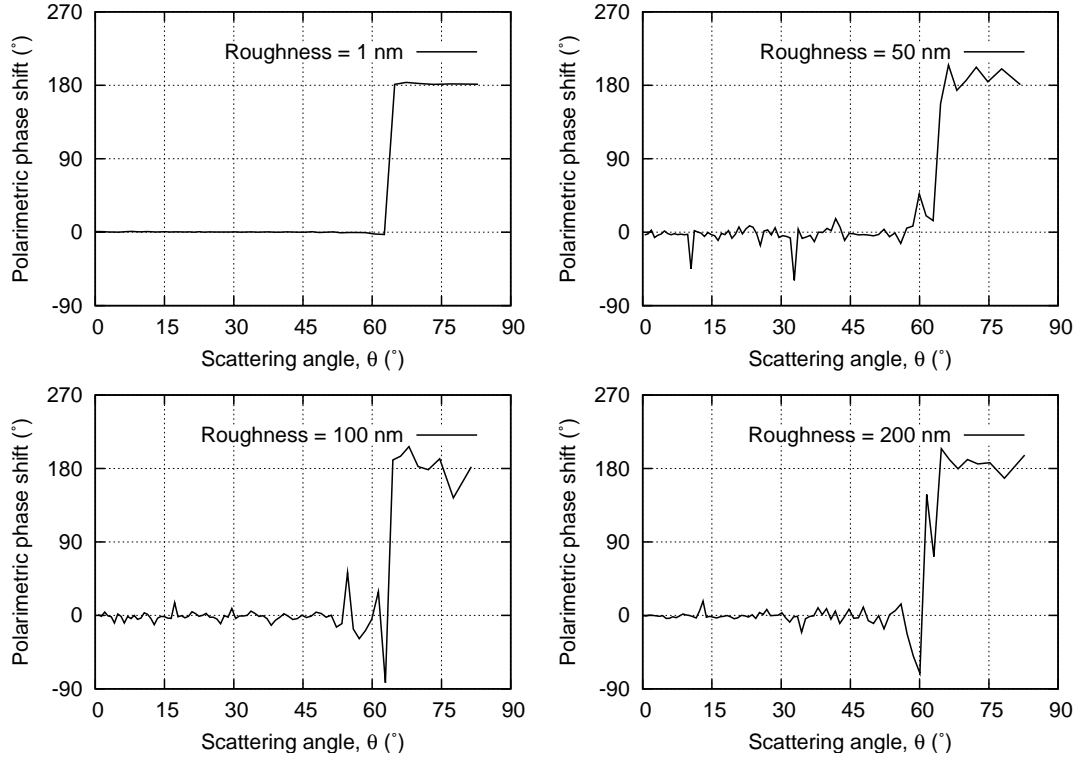
Dans le cas où l'inhomogénéité ou l'épaisseur de l'échantillon est importante, le niveau de diffusion est tel que l'on peut distinguer clairement le cas volumique du cas surfacique à partir d'une mesure d'intensité.

Par contre dans le cas d'une faible inhomogénéité ou d'une faible épaisseur, l'allure des courbes n'est pas fondamentalement différente de celles observées dans le cas d'une diffusion de surface. Dans ce cas, une mesure ellipsométrique du champ diffusé permet l'identification de l'origine, volumique ou surfacique, de la diffusion [62, 66, 10].

## 4 Déphasage polarimétrique de la lumière diffusée

### 4.1 Diffusion par une surface rugueuse

Dans le cas d'une surface diélectrique de faible rugosité, nos calculs montrent que, lorsque l'incidence d'éclairement est suffisamment élevée, le déphasage polarimétrique tracé en fonction de l'angle de diffusion présente un saut de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  (Fig. 1.11,  $R_q = 1$  nm). Ce phénomène déjà connu et expliqué par la théorie du premier ordre [65], est lié à l'existence d'un angle de diffusion  $\theta_b$ , pour lequel le champ diffusé en polarisation p (ou TM) change de signe. Cet



**Figure 1.11** Calcul du déphasage polarimétrique du champ diffusé par des surfaces rugueuses de pente 15%, pour différentes valeurs de la rugosité. La longueur d'onde est de 632,8 nm, l'indice de réfraction égal à 1,5 et l'angle d'incidence de 50°.

angle, nommé angle de pseudo-Brewster, vaut

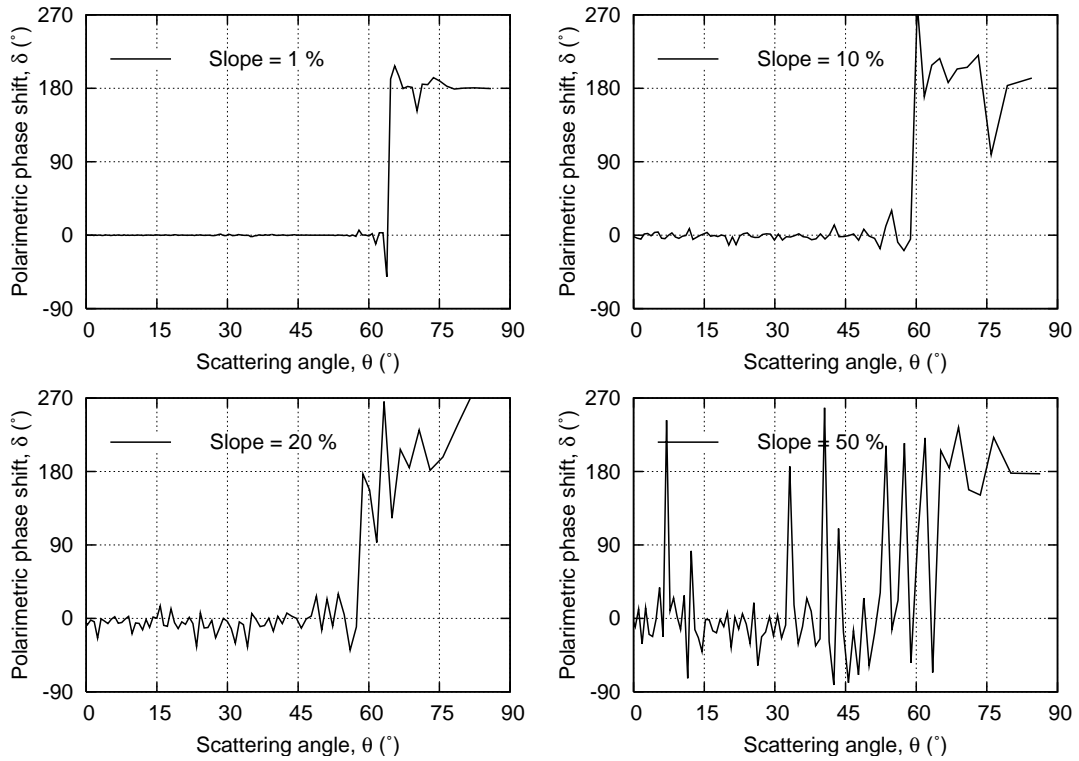
$$\theta_b = \arcsin \left( \sqrt{\frac{\nu^2(\nu^2 - \sin^2 \theta_i)}{\nu^2 + (\nu^4 - 1) \sin^2 \theta_i}} \right), \quad (1.13)$$

d'après la théorie du premier ordre. Ce changement de signe de la composante p du champ se traduit par un saut de 180° dans le déphasage.

Quand la rugosité augmente, les mesures montrent, qu'en plus du saut, des oscillations apparaissent sur le déphasage polarimétrique [62]. La présence de ces oscillations est confirmé par nos calculs (Fig. 1.11 et [10]). De plus, les simulations montrent que l'amplitude de ces oscillations reste faible tant que la pente de la surface est modérée ( $w \sim 20\%$  au plus) (Fig. 1.11), y compris quand la rugosité est de l'ordre de la longueur d'onde.

Par contre si la pente est plus importante (Fig. 1.12), l'amplitude des oscillations est telle que le déphasage prend un aspect aléatoire, similaire à celui du champ diffusé par les structures fortement hétérogène en volume.

En résumé ces simulations montrent que les oscillations dépendent beaucoup plus de la pente que de la rugosité. Pour une valeur modérée de la pente,



**Figure 1.12** Calcul du déphasage polarimétrique du champ diffusé par des surfaces rugueuses d'une rugosité de 100 nm, pour différentes valeurs de la pente. Mêmes paramètres que pour la figure 1.11.

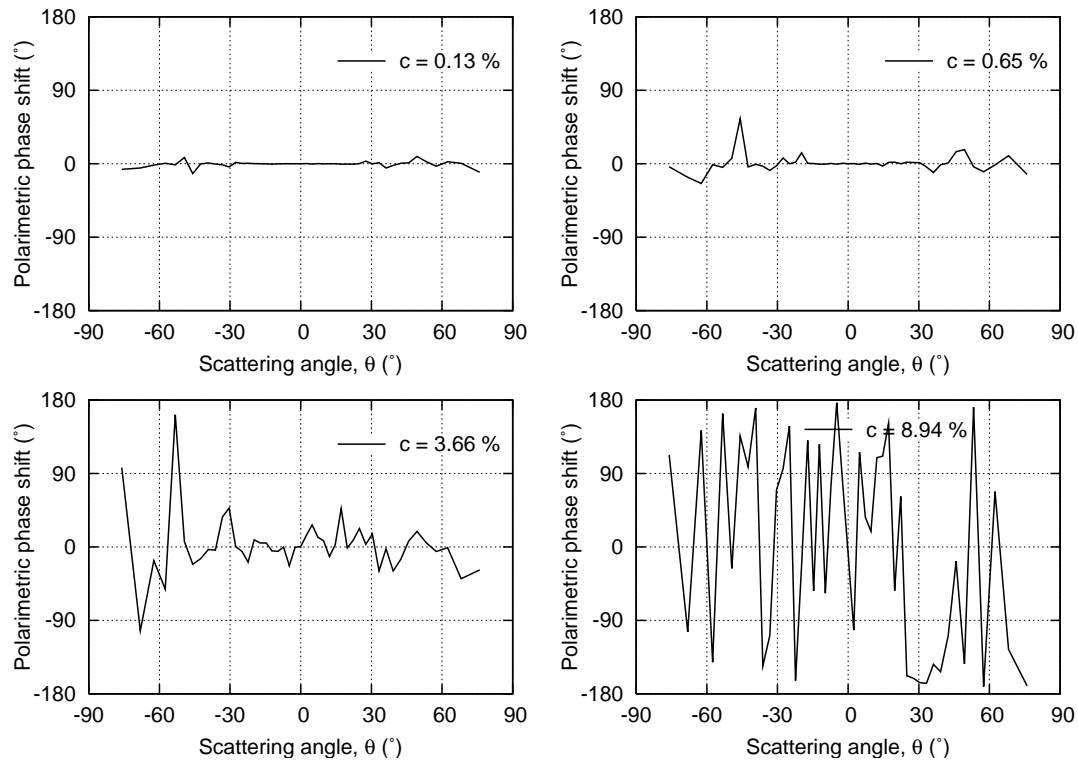
on constate qu'augmenter la rugosité ne fait pas varier notablement l'amplitude des oscillations. La présence du saut de phase étant en général caractéristique de la diffusion surfacique, ce critère a été largement utilisé pour distinguer les diffusions surfacique et volumique [61, 9, 66]. Les oscillations de la phase sont, quand à elles, liées à la rugosité et à la pente moyenne de la surface [62, 10].

## 4.2 Diffusion par un volume hétérogène

### Influence de l'inhomogénéité relative

Sauf cas particulier (cf. paragraphe 4.3), le champ diffusé par une structure hétérogène ne présente pas de saut de phase comme dans le cas d'une surface rugueuse.

Dans le cas où l'inhomogénéité relative est faible, les calculs effectués par la théorie de la diffusion au premier ordre par des volumes inhomogènes [67] montrent que le déphasage polarimétrique du champ diffusé est égal à 0°, quel que soit l'angle de diffusion. Ce résultat est confirmé par nos simulations (Fig.



**Figure 1.13** Calculs du déphasage polarimétrique du champ diffusé par des structures hétérogènes pour différents contrastes (inhomogénéités) d'indice. L'angle d'incidence est  $\theta_i = 50^\circ$ , la profondeur est de  $20\mu\text{m}$ , la longueur de corrélation de  $0,7\mu\text{m}$ , la longueur d'onde de  $632,8\text{ nm}$ , l'indice de réfraction varie entre 1,0 et 2,0 pour chaque structure, selon la valeur de l'inhomogénéité.

1.13,  $I_q = 0,13\%$ ).

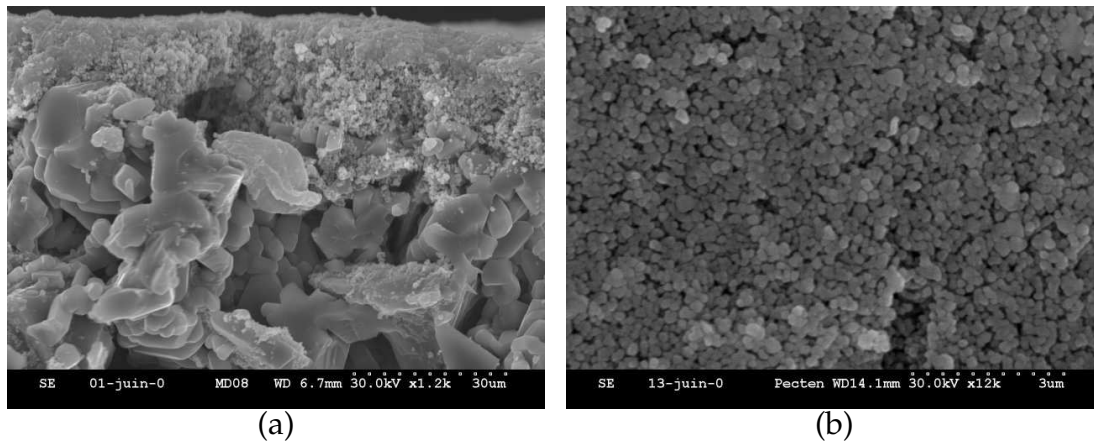
Dans le cas où l'inhomogénéité relative est forte, O. Gilbert et al. [62] ont montré expérimentalement que le déphasage polarimétrique varie de façon aléatoire entre 0 et  $360^\circ$ . Ces observations sont également confirmées par nos simulations (Fig. 1.13,  $I_q = 8,94\%$  et Ref. [10]).

Globalement, pour une épaisseur et une longueur de corrélation donnée, on observe que l'amplitude des oscillations augmente avec l'inhomogénéité relative (Fig. 1.13).

#### Application à la caractérisation de membranes de filtration

Des mesures de diffusion, effectuées dans notre équipe, sur des membranes de filtration ont révélé que la variation du déphasage polarimétrique à l'échelle du grain de speckle, dépendait de la porosité de la membrane.

Ces mesures sont intéressantes car, au fur et à mesure de leur utilisation, les membranes se colmatent progressivement et il est nécessaire de pouvoir



**Figure 1.14** Images par microscope électronique à balayage d'une membrane dont le seuil de coupure est égal à 100 nm. (a) Coupe de la membrane : la peau (ici d'épaisseur  $\sim 10\mu\text{m}$ ), dont la porosité contrôle la filtration, est déposée sur un substrat de granulométrie plus importante. (b) Vue de dessus de la peau.

quantifier cette évolution. Par rapport à d'autres techniques de mesure, AFM ou microscopie électronique par exemple, la diffusion lumineuse est un moyen de contrôle qui a l'avantage d'être non destructif et de pouvoir être réalisé in-situ.

Les membranes étudiées sont composées de grain d'oxyde de zirconium<sup>2</sup> agglomérés. La membrane est composée d'une peau de faible granulométrie, déposée sur un matériau de granulométrie plus importante (Fig. 1.14).

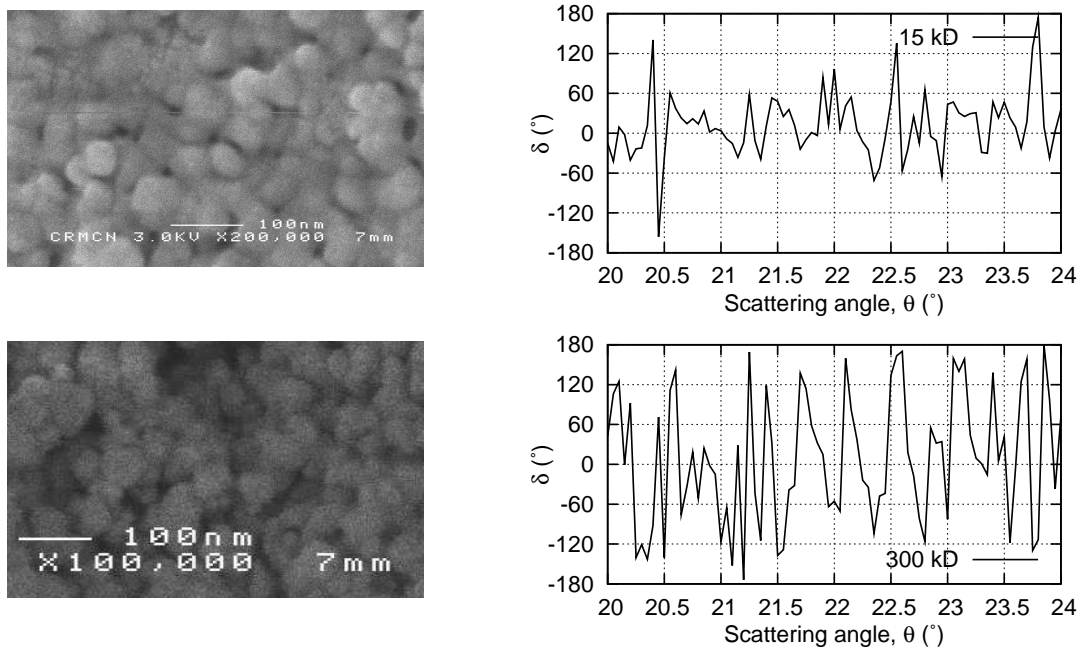
La figure 1.15 montre les images de la peau de deux membranes de porosités différentes ainsi que les mesures du déphasage polarimétrique correspondantes. On constate que l'amplitude des oscillations est plus importante pour la membrane de plus grande porosité. On pourra se référer à [64, 11] pour une étude plus systématique de ces résultats expérimentaux.

Pour confirmer ces résultats nous avons effectué des simulations du champ diffusé en fonction de la taille des grains. Nous avons modélisé la peau de la membrane par une structure de  $0,5\mu\text{m}$  d'épaisseur, composée d'un matériau d'indice 2,2 et d'air. Les cartographie d'indice (Fig. 1.16) ont été créées à partir de cartes aléatoires convoluées par une gaussienne (voir Fig. 1.6 par exemple) auxquelles on a appliqué un seuil de coupure pour obtenir des cartes de valeurs binaires.

Nos simulations (Fig. 1.16) confirment que l'amplitude des oscillations du déphasage diminue avec la taille des grains.

Ces résultats peuvent se comprendre de façon intuitive : A l'échelle de la longueur d'onde, le matériau est d'autant plus homogène que la taille des grains est faible. Hors quand l'inhomogénéité diminue nous avons vu (Fig.

<sup>2</sup> Matériau diélectrique, d'indice de réfraction  $n = 2,2$  pour la longueur d'onde 632,8 nm



**Figure 1.15** Images SEM de deux membranes de porosités 15 kDa et 300 kDa (*kiloDalton* : unité de masse atomique, également utilisée pour caractériser la porosité), et mesures du déphasage polarimétrique correspondantes. Les deux images sont présentées à la même échelle. L'amplitude des oscillations du déphasage polarimétrique mesuré est plus grande pour la membrane la plus poreuse. (Bien que les images SEM semblent montrer des tailles de grain similaires pour les deux membranes, on remarque que ces grains sont agglomérés entre eux et forment des grains plus gros pour la membrane de 300 kDa).

1.13) que le déphasage est proche de  $0^\circ$  et présente peu d'oscillations.

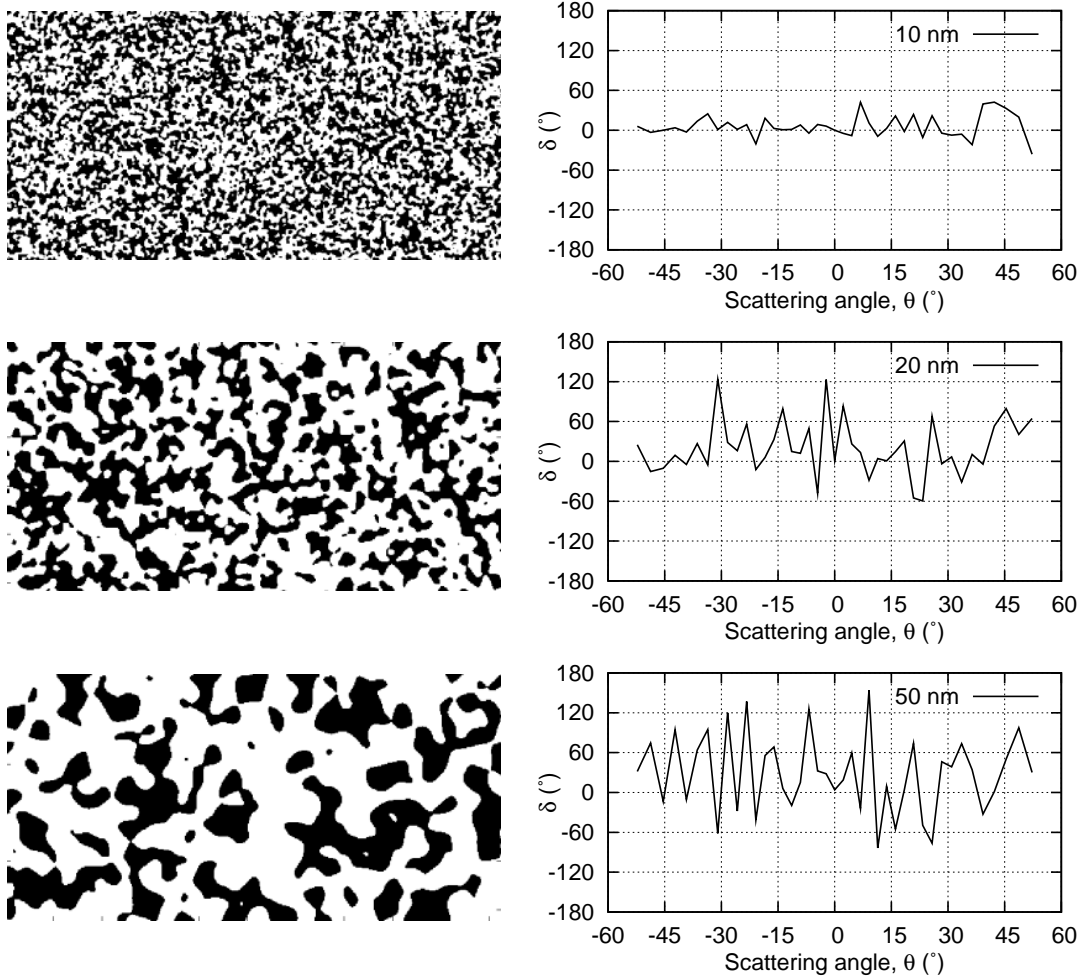
Notons que l'inhomogénéité relative calculée selon l'expression (1.12) est la même quelle que soit la taille des grains. Cependant, il n'en irait pas de même si on effectuait un lissage à l'échelle de la longueur d'onde avant d'appliquer la formule (1.12).

### 4.3 Cas intermédiaires entre diffusion surfacique et volumique

#### Saut de phase dans le cas d'inclusions volumiques

Comme nous l'avons vu, la présence d'un saut de phase est en général considérée comme une signature de l'origine surfacique de la diffusion [61, 9, 66]. Ce saut de phase peut être interprété comme un passage au delà de l'angle





**Figure 1.16** Modélisation du déphasage polarimétrique du champ diffusé par des membranes de filtration de différentes porosités. Les membranes sont constituées d'oxide de zirconium (en blanc,  $\nu = 2,2$ ) et d'air (en noir). Trois membranes sont représentées pour des tailles de grain de 10 nm, 20 nm, et 50 nm. La porosité, qui correspond à la taille des plus grosse particules pouvant traverser la membrane, est liée à la taille des grains et est du même ordre de grandeur qu'elle. On observe que l'amplitude des oscillations du déphasage polarimétrique est d'autant plus grande que la porosité est importante. Les calculs sont effectués pour une longueur de  $16 \mu\text{m}$  et une épaisseur de  $0,5 \mu\text{m}$  et on a considéré une invariance selon  $y$ . La longueur d'onde est de 632,8 nm et l'incidence normale. La zone représentée mesure  $1 \mu\text{m} \times 0,5 \mu\text{m}$ .

de Brewster pour le rayon réfléchi localement<sup>3</sup>.

On peut supposer que, dans le cas d'inclusions volumiques présentant une interface bien définie, ce phénomène de Brewster a également lieu et entraîne un saut de phase. Si c'est le cas, le saut de phase n'est pas strictement caractéristique de la diffusion surfacique, mais de la présence d'interfaces nettes au sein de la structure diffusante.

La figure 1.17 présente le déphasage polarimétrique calculé pour plusieurs structures composées d'inclusions sphériques d'un matériau d'indice 1,1 dans une matrice d'indice 1. Les structures sont considérées invariantes selon  $y$ .

Dans le cas de la structure ayant la plus faible densité d'inclusions ( $0,4 \text{ inclusion}/\mu\text{m}^2$ ), on observe un saut de phase de  $0$  à  $180^\circ$  avec un bruit important. Le saut se produit avec un décalage d'environ  $15^\circ$  par rapport à ce que l'on observe pour une surface rugueuse d'indice 1,1 dans les mêmes conditions d'éclairement. Le déphasage devient de plus en plus bruyé quand on augmente encore la densité des inclusions.

Dans le cas de structures avec un contraste d'indice plus important, les oscillations augmentent encore et masquent complètement le saut de phase.

Ces calculs montrent que le saut de phase n'est pas strictement lié à une diffusion par une surface rugueuse. Cependant, pour observer un saut de phase dans le cas d'inclusions volumiques, nos calculs montrent qu'il faut un faible contraste d'indice et une faible densité d'inclusions. Dans le cas contraire le saut est noyé dans les oscillations du déphasage et on observe une figure caractéristique de la diffusion par une structure très hétérogène en volume.

Il est donc peu probable de rencontrer un échantillon qui présente toutes les caractéristiques nécessaires à l'observation d'un saut de phase dans le cas d'inclusions volumiques. En pratique la présence d'un saut de phase reste donc un indicateur fiable de l'origine surfacique de la diffusion.

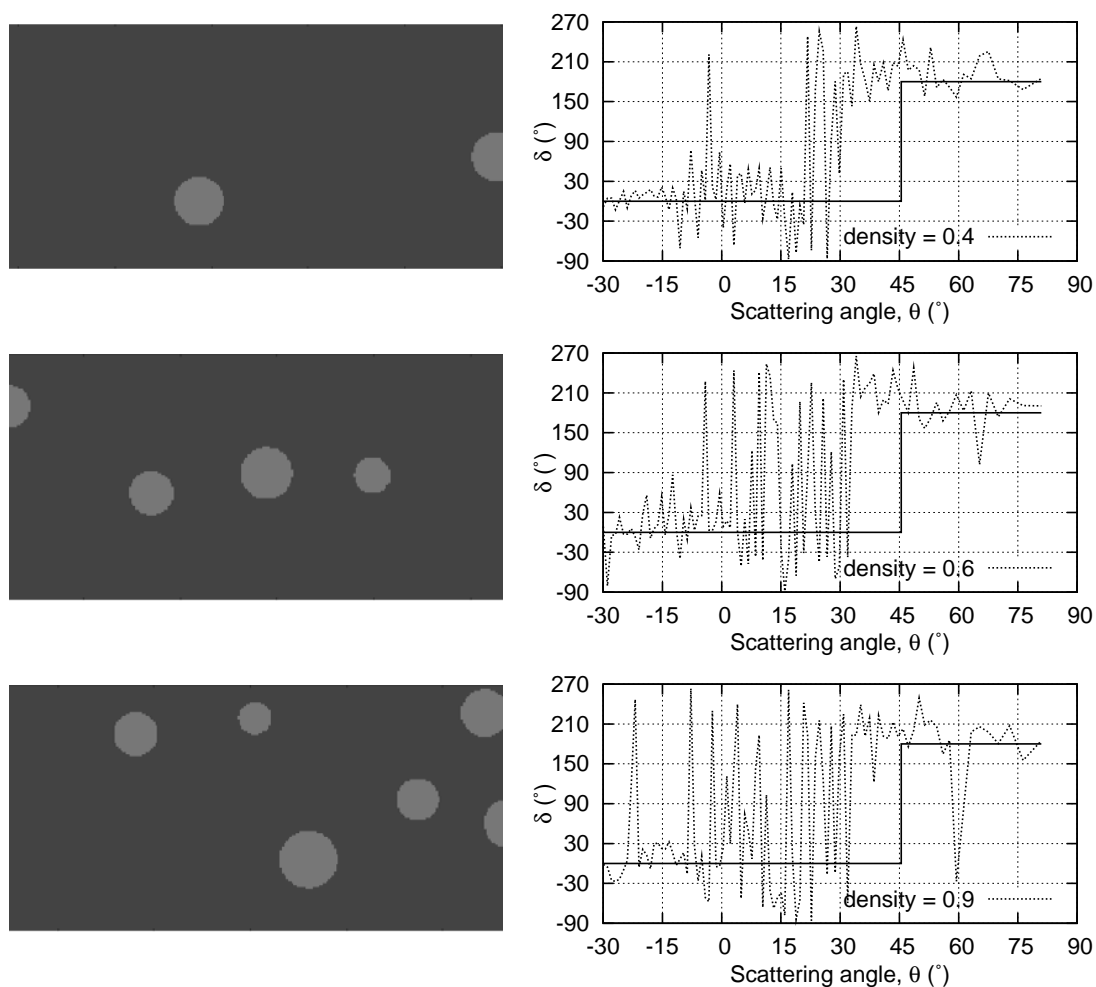
### Transition entre surface rugueuse et volume hétérogène

Nous avons vu que, dans le cas de faibles rugosités ou de faibles pentes, la diffusion de surface est caractérisée par un saut du déphasage polarimétrique de  $0$  à  $180^\circ$ , quand l'angle d'incidence est suffisant. Dans les mêmes conditions, la diffusion volumique, dans le cas d'une faible inhomogénéité, est caractérisée par une phase à peu près constante autour de  $0^\circ$ .

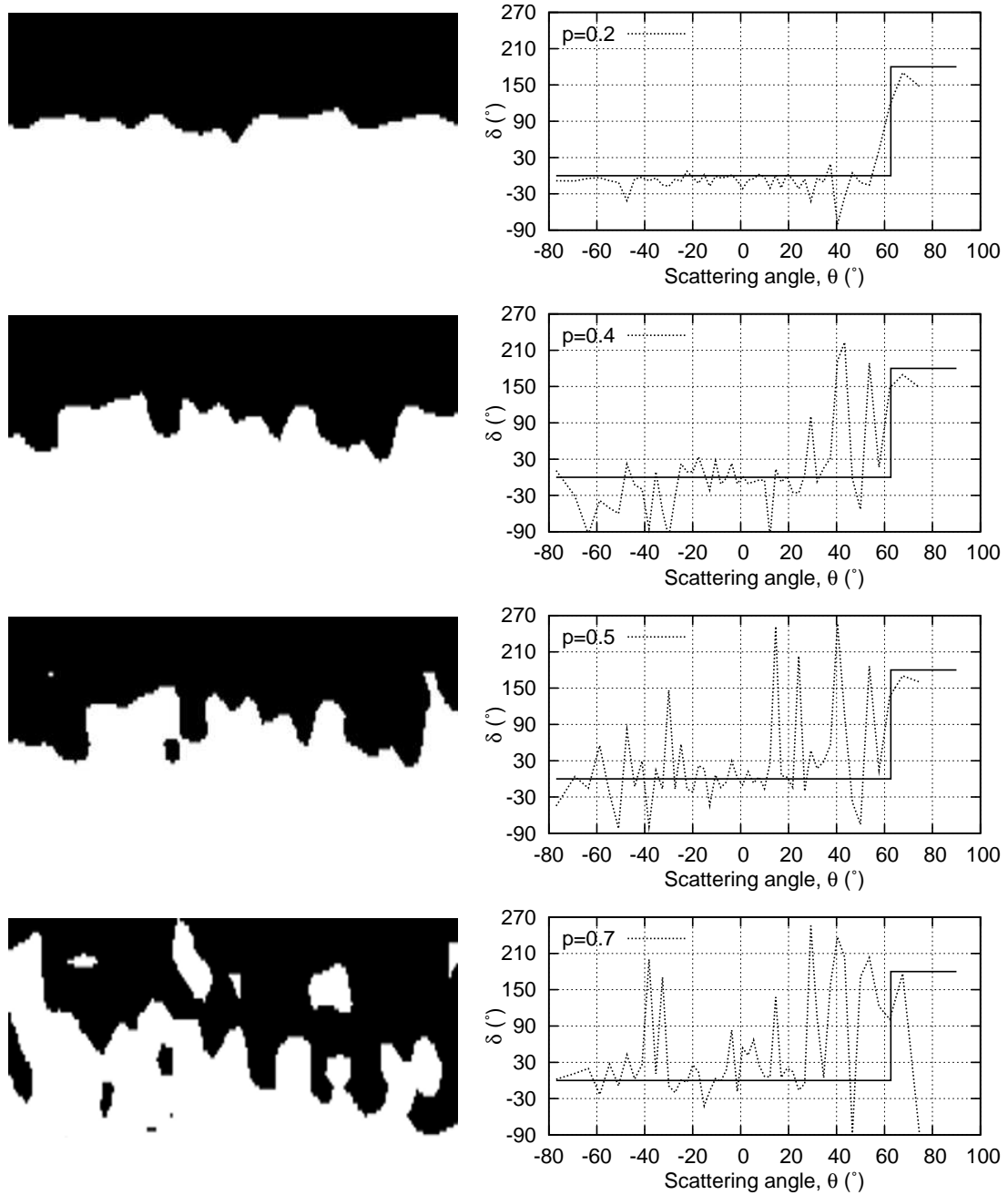
La figure 1.18 étudie la transition entre une diffusion de type surfacique et une diffusion de type volumique. Les structures sont considérées invariantes selon  $y$ .

---

<sup>3</sup>Cette interprétation est valable seulement dans le cas où la surface varie lentement à l'échelle de la longueur d'onde, par contre, le saut de phase peut être observé quelquefois à l'échelle de variation de la surface.



**Figure 1.17** Calcul du déphasage polarimétrique du champ diffusé par des structures d'indice 1 contenant des inclusions d'indice 1,1 pour différentes densités d'inclusions (en inclusions /  $\mu\text{m}^2$ ). En plus des résultats obtenus par la méthode différentielle (en pointillés), on a représenté le saut théorique donné par un modèle de réflexions locales (cf. chapitre suivant). Longueur d'onde  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ , angle d'incidence  $\theta_i = 50^{\circ}$ . La zone représentée mesure  $1\mu\text{m} \times 0,5\mu\text{m}$ , les calculs portent sur une longueur de  $16 \mu\text{m}$  et une épaisseur de  $0,5 \mu\text{m}$ .



**Figure 1.18** Calculs du déphasage polarimétrique avec simulation d'une transition entre surface rugueuse et volume hétérogène. Le matériau à un indice de 1,5, la longueur d'onde est  $0,633 \mu\text{m}$ , l'angle d'incidence  $50^\circ$ . Les calculs sont effectués pour une longueur de  $16 \mu\text{m}$  et une épaisseur de  $1 \mu\text{m}$ ; la zone représentée mesure  $2 \times 1 \mu\text{m}$ .

Les cartes d'indice ont été obtenues à partir de cartes aléatoire convoluées par une gaussienne (voir Fig. 1.6 pour un exemple d'une telle carte) auxquelles ont été appliqué un seuil de coupure variant linéairement en fonction de  $z$ .

On constate que plus on s'approche d'une structure diffusante de type volumique, plus les oscillations du déphasage augmentent et masquent progressivement le saut de phase. En fait la structure volumique que l'on obtient en déformant progressivement la surface est du type fortement hétérogène, et présente des oscillations importantes du déphasage et non une phase quasi constante autour de zéro comme dans le cas d'un volume faiblement hétérogène.

## 5 Bilan

Grâce à une confrontation avec des données expérimentales, nous avons, dans ce chapitre, validé l'utilisation de la méthode différentielle dans le cas des surfaces de fortes rugosité.

Nous avons ensuite appliqué cet outil à l'étude de la discrimination de l'origine surfacique ou volumique de la diffusion. Nos calculs confirment les résultats antérieurement observés et démontrés par la théorie du premier ordre dans le cas des faibles diffusions, à savoir que le déphasage polarimétrique du champ diffusé par une surface rugueuse éclairée avec un angle d'incidence suffisamment élevé, présente un saut de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  et que ce saut n'est pas présent dans le cas d'un matériau inhomogène dont l'indice varie de façon continue. Ce point constitue une base pour la discrimination de l'origine de la diffusion. D'autre part, dans le cas des fortes diffusions, nous confirmons les observations expérimentales, qui montrent une variation du déphasage polarimétrique d'un grain de speckle à l'autre et nous montrons que ce phénomène est essentiellement lié à la pente de la surface, les surface de faibles pentes présentant peu d'oscillations.

Enfin, même si la présence d'interfaces nettes au sein du matériau pourrait, en principe conduire à la présence d'un saut de phase, puisqu'il s'agit d'un phénomène de type Brewster, nous avons montré qu'en pratique, ce saut est noyé dans les oscillations de la phase, dans la majorité des cas. Ceci signifie que la présence d'un saut de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  dans la figure du déphasage polarimétrique est une signature fiable d'une diffusion surfacique.

## Chapitre 2

# Annulation ellipsométrique de la diffusion : cas des fortes rugosités

Une procédure permettant d'annuler sélectivement la lumière diffusée selon son origine surfacique ou volumique a été proposée en 2005 par C. Amra, C. Deumié et O. Gilbert, dans le cas des faibles diffusions [12]. Cette technique a ensuite été étendue à l'annulation sélective de la diffusion dans les multicouches [68, 69] et a fait l'objet d'une étude approfondie tant du point de vue théorique qu'expérimental durant la thèse de G. Georges [64, 70, 71].

Au niveau théorique, cette technique d'annulation sélective, a surtout été étudiée dans le cas des faibles diffusions, dans le cadre de la théorie du premier ordre. Le cas des fortes diffusions n'a pas encore été complètement traité, en partie faute d'outils de calcul adaptés.

Nous utilisons dans ce chapitre, la méthode différentielle pour étudier le problème de l'annulation dans le cas des fortes diffusions. Nous nous intéresserons, plus particulièrement, au cas des surfaces rugueuses de pentes modérées, qui constituent un cas pratique important et pour lesquelles la lumière diffusée présente des propriétés intéressantes en vue d'une annulation sélective.

### 1 Principe de la technique d'annulation ellipsométrique de la diffusion

Plusieurs études menées dans notre équipe ont confirmé que la diffusion d'une lumière polarisée conduit à un champ dont la polarisation reste parfaitement définie quand on utilise une résolution angulaire suffisamment fine [63, 62]. Le phénomène de *dépolarisation*, qui dans notre cas, correspond à la juxtaposition de plusieurs états de polarisation sur la surface du détecteur, peut toujours être réduit en diminuant cette surface ou en éloignant le détecteur de l'objet diffusant [64]. Et dans le cas où la lumière est parfaitement

polarisée, il est possible de l'annuler en utilisant une combinaison déphaseur + polariseur correctement réglés.

Nous rappelons ici le principe de base de cette technique et nous renvoyons à la thèse de G. Georges [64] pour une présentation plus approfondie.

Après diffusion, on peut écrire le champ  $E$  dans la direction  $k$ ,

$$E = (A_s + A_p)e^{ik \cdot r} \quad (2.1)$$

où  $A_s$  et  $A_p$  sont les composantes selon les directions de polarisation  $s$  et  $p$ , telles que

$$A_s = |A_s|e^{i\delta_s}\mathbf{s} \quad (2.2)$$

$$A_p = |A_p|e^{i\delta_p}\mathbf{p}, \quad (2.3)$$

avec  $\mathbf{s}$  et  $\mathbf{p}$  des vecteurs unitaires. On note  $\delta$  le déphasage polarimétrique, défini comme la différence de phase entre les composantes  $p$  et  $s$  du champ

$$\delta = \delta_p - \delta_s. \quad (2.4)$$

Si on introduit un déphaseur <sup>1</sup>, induisant un déphasage  $\eta = \eta_p - \eta_s$  entre  $p$  et  $s$ , puis un analyseur faisant un angle  $\psi$  avec la direction  $\mathbf{s}$ , la projection du champ sur la direction de l'analyseur s'écrit

$$A' = \cos \psi A_s + \sin \psi A_p e^{i\eta} \quad (2.5)$$

$$= \cos \psi (A_s + \tan \psi A_p e^{i\eta}). \quad (2.6)$$

On note  $f$  la transformation qui fait correspondre  $A$  à  $A'$  :

$$f(A) = \cos \psi (A_s + z A_p), \quad (2.7)$$

avec  $z$ , le nombre complexe défini par

$$z = \tan \psi e^{i\eta}. \quad (2.8)$$

L'annulation du champ après le déphaseur et l'analyseur est obtenue lorsque  $f(A) = 0$ , c'est à dire pour  $z = -A_s/A_p$ , ce qui correspond à un angle de l'analyseur tel que

$$\tan \psi = \frac{|A_s|}{|A_p|} \quad (2.9)$$

et à un retard de phase induit par le déphaseur

$$\eta = -\delta + \pi. \quad (2.10)$$

<sup>1</sup>En pratique, pour obtenir un déphasage ajustable, on peut utiliser une cellule de Pockels, un retardateur à cristaux liquides ou une lame quart d'onde montée sur une platine de rotation, cf. [64].

Si plusieurs sources de diffusion sont présentes, le champ dans une direction donnée est la somme des différentes contributions. Si ces contributions possèdent des paramètres ellipsométriques différents, il sera possible d'en annuler sélectivement une ou plusieurs, et ainsi de mettre en valeur une contribution particulière. Par exemple si l'on a trois contributions  $A_1$ ,  $A_2$  et  $A_{12}$ , correspondant respectivement, à deux sources 1 et 2, et à leur interaction. Le champ total est proportionnel à

$$A = A_1 + A_2 + A_{12}. \quad (2.11)$$

On peut, par exemple, choisir les paramètres d'annulation tels que  $f(A_1 + A_{12}) = 0$  et il ne reste alors, que la contribution  $f(A_2)$  liée à la source 2 ( $f$  étant une transformation linéaire). Cette technique présente un fort intérêt pour l'imagerie en milieu diffusant, puisqu'elle permet par exemple, dans certaines conditions, d'annuler le champ de diffusion afin d'augmenter le contraste d'un objet que l'on souhaite observer, cf. [64].

Ceci étant, il faut connaître les paramètres ellipsométriques des contributions que l'on souhaite annuler, ce qui demande en général de recourir à une modélisation de la diffusion.

## 2 Détermination théorique des paramètres d'annulation

### 2.1 Cas des grandes longueurs de corrélation : modèle des réflexions locales

Dans le cas où la longueur de corrélation de la surface est grande devant la longueur d'onde, la diffraction est faible et on peut modéliser la diffusion dans l'approximation de l'optique géométrique.

La diffusion peut alors être interprétée comme l'ensemble des réflexions spéculaires par les faces de différentes inclinaisons de la surfaces rugueuse.

Dans le cadre de ce modèle, et en considérant uniquement la diffusion dans le plan d'incidence, l'angle de diffusion  $\theta$  est lié à l'angle d'incidence  $\theta_i$  et à l'angle local d'incidence  $\theta_{\text{local}}$  (cf. Fig. 2.1) par

$$\theta = 2\theta_{\text{local}} - \theta_i \quad (2.12)$$

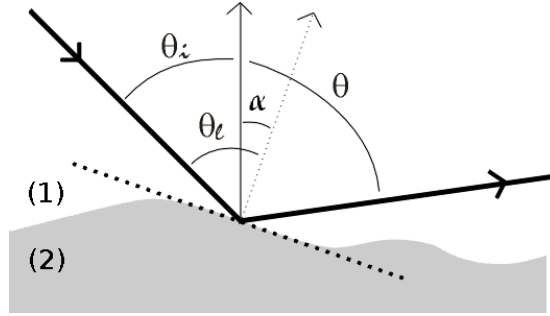
soit,

$$\theta_{\text{local}} = \frac{\theta + \theta_i}{2}. \quad (2.13)$$

Les amplitudes complexes  $A_s$  et  $A_p$  du champ après réflexion peuvent s'écrire à partir du champ incident  $A_0$  et des coefficients de réflexions complexes  $r_s$  et  $r_p$ ,

$$A_s = r_s A_0 \quad (2.14)$$





**Figure 2.1** Relation entre l'angle d'incidence  $\theta_i$ , l'angle de diffusion  $\theta$  et l'angle d'incidence local  $\theta_{\text{local}} = \theta_l$ .

et

$$A_p = r_p A_0. \quad (2.15)$$

#### Rapport des amplitudes $A_p$ et $A_s$

L'angle de l'analyseur est déduit du rapport  $A_p/A_s$ . Ce dernier s'obtient à partir des coefficients de Fresnel  $r_s$  et  $r_p$ ,

$$r_s = \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \quad (2.16)$$

et

$$r_p = \frac{\beta_1 - \beta_2/\nu^2}{\beta_1 + \beta_2/\nu^2}. \quad (2.17)$$

L'indice de réfraction du milieu 2 est  $\nu$  et celui du milieu 1 est considéré égal à 1.  $\beta_1$  et  $\beta_2$  sont définis par

$$\beta_1 = k \cos\left(\frac{\theta_i + \theta}{2}\right) \quad (2.18)$$

et

$$\beta_2 = k \sqrt{\nu^2 - \sin^2\left(\frac{\theta_i + \theta}{2}\right)}. \quad (2.19)$$

Le rapport  $A_p/A_s = r_p/r_s$  s'exprime donc comme

$$\frac{A_p}{A_s} = \left(\frac{\beta_1 + \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}\right) \left(\frac{\nu^2 \beta_1 - \beta_2}{\nu^2 \beta_1 + \beta_2}\right). \quad (2.20)$$

#### Déphasage polarimétrique $\delta$

Le déphasage polarimétrique est défini par

$$\delta = \arg\left(\frac{r_p}{r_s}\right).$$

Dans le cas d'un milieu diélectrique, qui est le cas qui nous intéresse essentiellement, le coefficient  $r_s$  est réel et positif quel que soit l'angle de réflexion local et le coefficient  $r_p$  est réel mais s'annule et change de signe lorsque l'angle d'incidence local passe au delà de l'angle de Brewster, c'est à dire pour

$$\frac{\theta_i + \theta}{2} = \arctan(\nu).$$

Le rapport  $r_p/r_s$  est donc réel et positif quand l'angle d'incidence local est inférieur à l'angle de Brewster, ce qui implique  $\delta = 0^\circ$  et négatif au delà ce qui implique  $\delta = 180^\circ$  (modulo  $360^\circ$ ). La figure de déphasage présente donc un saut net de  $0^\circ$  à  $180^\circ$ . L'angle de diffusion correspondant au saut est

$$\theta_{\text{saut}} = 2 \arctan(\nu) - \theta_i, \quad (2.21)$$

Par exemple, pour un échantillon en verre rugueux ( $\nu = 1,5$ ) éclairé à  $50^\circ$ , le saut à lieu pour  $\theta = 62,62^\circ$ .

## 2.2 Cas des faibles rugosités et faibles hétérogénéités : théorie du premier ordre

Dans le cas d'une surface de faible rugosité ou d'un volume de faible hétérogénéité, le champ diffusé peut être considéré comme une perturbation du champ total et calculé à l'aide d'un développement au premier ordre [65, 67].

Dans ces conditions, l'intensité diffusée en fonction de la pulsation spatiale,  $\sigma$ , est proportionnelle au spectre de rugosité ou d'hétérogénéité  $\gamma(\sigma - \sigma_0)$ ,

$$I(\sigma) = C(\sigma, \sigma_0) \gamma(\sigma - \sigma_0) \quad (2.22)$$

avec  $\sigma_0$  la pulsation spatiale de l'onde incidente et  $\sigma$  celle de l'onde diffusée.

$C(\sigma, \sigma_0)$  est un coefficient qui, en plus de dépendre de  $\sigma$  et de  $\sigma_0$ , dépend de l'indice de réfraction, de la longueur d'onde, de la polarisation et de la nature (surface rugueuse ou milieu inhomogène) de l'objet diffusant. Par contre,  $C(\sigma, \sigma_0)$  est indépendant de la microstructure particulière de cet objet.

Toutes les informations concernant la microstructure sont contenues dans le terme  $\gamma(\sigma - \sigma_0)$ .

Dans le cas d'une surface rugueuse,  $\gamma(\sigma)$  est le spectre de rugosité de la surface :

$$\gamma(\sigma) = \frac{4\pi^2}{S} |\tilde{h}(\sigma)|^2, \quad (2.23)$$

où  $\tilde{h}(\sigma)$  est la transformée de Fourier du profil  $h(r)$  de la surface et  $S$  l'aire éclairée.

Dans le cas d'un volume hétérogène dont l'indice varie de façon transverse, c'est à dire tel que  $\nu(x, y, z) = \nu(x, y)$ ,  $\gamma(\sigma)$  est défini par

$$\gamma(\sigma) = \frac{4\pi^2}{S} |\tilde{p}(\sigma)|^2, \quad (2.24)$$

où  $\tilde{p}(\sigma)$  est la transformée de Fourier de la variation relative de la permittivité  $p(\mathbf{r}) = \Delta\epsilon(\mathbf{r})/\epsilon(\mathbf{r})$ .

Notons que, dans le cadre de la théorie du premier ordre, la polarisation croisée (s→p ou p→s) est nulle dans le plan d'incidence.

De plus, on montre [65] que, pour une surface rugueuse éclairée en polarisation p, il existe un angle  $\theta_b$  pour lequel le coefficient C s'annule puis change de signe. Cet angle est appelé pseudo angle de Brewster et vaut

$$\theta_b = \arcsin \left( \sqrt{\frac{\nu^2(\nu^2 - \sin^2 \theta_i)}{\nu^2 + (\nu^4 - 1) \sin^2 \theta_i}} \right). \quad (2.25)$$

Ce changement de signe du champ équivaut à un saut de  $180^\circ$  du déphasage polarimétrique, qui vaut  $0^\circ$  pour  $\theta < \theta_b$  et  $180^\circ$  au delà de  $\theta_b$ .

Par exemple, pour un échantillon en verre rugueux ( $\nu = 1,5$ ) éclairé à  $50^\circ$ , l'annulation du champ diffusé en polarisation p et le saut du déphasage ont lieu pour un angle de diffusion  $\theta_b = 63,98^\circ$ .

### 2.3 Cas général : méthode différentielle

La méthode différentielle permet de calculer les paramètres d'annulation quel que soit l'origine surfacique ou volumique de la diffusion et quel que soit la rugosité et la longueur de corrélation. Par contre la durée des calculs contraint à ne pas dépasser des longueurs de 50 à 100 microns environ dans le cas de structures invariantes selon une dimension et de quelques microns dans le cas de structures tridimensionnelles quelconques.

Dans la suite nous utiliserons uniquement le code destiné aux structures invariantes selon une dimension. Nous constaterons que même avec cette hypothèse les résultats sont parfaitement cohérents avec ceux des deux codes tridimensionnels approximatifs que nous venons de présenter, dans leur domaines de validité respectifs.

## 3 Cas des surfaces de forte pente et des volumes de forte hétérogénéité

On définit la pente  $w$  d'une surface rugueuse comme la racine de la valeur quadratique moyenne de la dérivée de la hauteur de la surface. Dans le cas d'une surface ne dépendant que de la variable  $x$ , on a

$$w^2 = \frac{1}{L} \int_x \left( \frac{dh(x)}{dx} \right)^2 dx, \quad (2.26)$$

où  $h(x)$  désigne la hauteur de l'interface et  $L$  la longueur de la surface selon  $x$ .

Dans le cas des très faibles rugosités on observe [64] que les paramètres d'annulation,  $|A_p|/|A_s|$  et  $\delta$ , varient lentement en fonction de  $\theta$  et sont indépendants des variations rapides d'intensité qui forment le speckle.

Lorsque la rugosité devient plus importante et que la pente reste modérée ( $< 20\%$ ), O. Gilbert a montré expérimentalement que des variations du déphasage polarimétrique apparaissent à l'échelle du speckle [62]. Nos simulations [10] ont ensuite montré que ces oscillations restaient de faible amplitude tant que les pentes sont modérées.

Lorsque la pente devient supérieure à 15 ou 20% environ, il est difficile de trouver des échantillons pour faire des mesures, la plupart d'entre eux ayant des pentes inférieures ou égales à ces valeurs ; par contre les simulations restent possibles. Les calculs présentés figure 2.2 montrent la variation des paramètres ellipsométriques,  $|A_p|/|A_s|$  et  $\delta$ , en fonction de l'angle de diffusion, dans le cas d'une surface diélectrique de forte pente ( $w = 100\%$ , soit  $45^\circ$ ). On constate des variations d'amplitude importante à l'échelle du grain de speckle, bien que la rugosité soit modérée ( $R_q = 100$  nm). L'annulation du champ diffusé par cette surface demande donc un ajustement de l'angle de l'analyseur et du retard de phase pour chaque grain de speckle, ce qui est plus facilement réalisable avec un dispositif spécifique : utilisation d'une matrice pixélisée de cristaux liquides par exemple.

Contrairement au cas des faibles diffusions, la valeur des paramètres d'annulation dépend de la microstructure particulière de l'échantillon et pas seulement de ces propriétés statistiques.

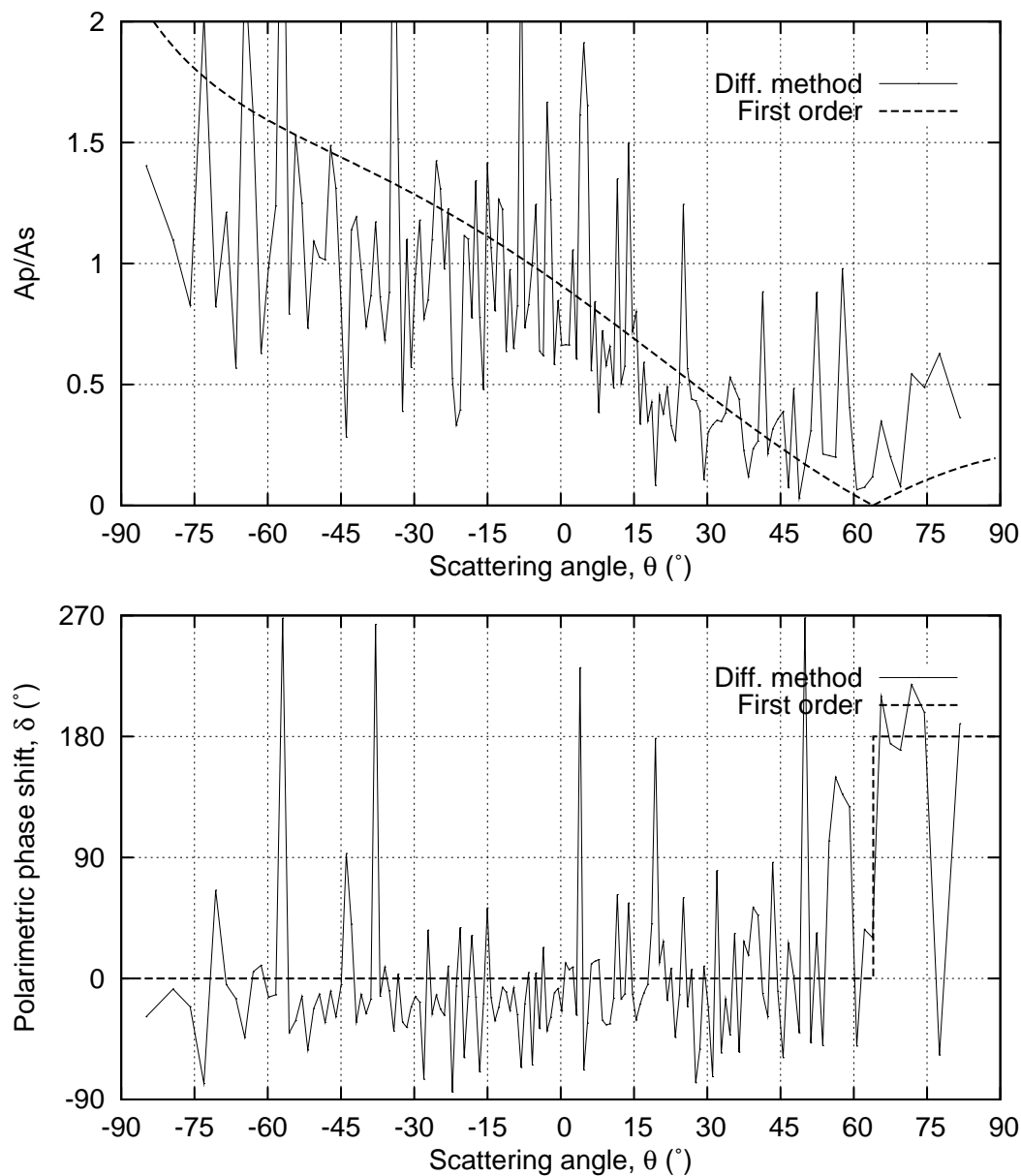
La procédure d'annulation demande donc, en principe, la mesure préalable de la topologie de la surface puis le calcul de la diffusion par une méthode rigoureuse tridimensionnelle. Cependant, La méthode différentielle tridimensionnelle ne permet pas actuellement le calcul du champ diffracté pour un faisceau dont le diamètre correspond aux conditions expérimentales ( $\sim 1$  mm) en raison des limitations imposées par la mémoire vive et par la durée des calculs (cf. chapitre 4 de la première partie).

Ceci étant, il reste possible d'ajuster expérimentalement les paramètres de façon à minimiser la totalité du champ, ce qui revient à caractériser l'état de polarisation du champ total. Mais ceci ne permet pas, pour l'instant <sup>2</sup>, d'annuler sélectivement un signal particulier.

Le cas des milieux fortement hétérogènes en volume est assez semblable à celui des surfaces de fortes pentes. Les mesures [62, 63, 64] montrent que le déphasage polarimétrique et le rapport  $A_p/A_s$  varient avec une grande amplitude à l'échelle du grain de speckle dans le cas d'un échantillon fortement hétérogène. Nos simulations, cf. chapitre précédent et [10], confirment ces résultats.

---

<sup>2</sup>des recherches sont en cours à l'Institut Fresnel sur ce sujet.



**Figure 2.2** Paramètres ellipsométriques  $|A_p|/|A_s|$  et  $\delta$  du champ diffusé par une surface rugueuse de forte pente ( $w = 100\%$ , soit  $45^\circ$ ) et pour une rugosité de 100 nm. Les paramètres sont représentés en fonction de l'angle de diffusion, l'angle d'incidence est de  $50^\circ$ , la longueur d'onde est de 632,8 nm et l'échantillon est diélectrique avec un indice de réfraction égal à 1,5.

L'annulation sélective de la diffusion par un volume très hétérogène demande donc une procédure similaire à celle des surfaces de fortes pentes (ajustement des paramètres pour chaque grain de speckle, prise en compte de la microstructure, etc.), ce qui présente de nombreux défis. Si ces défis parviennent à être relevés, cette technique pourra présenter des applications considérables dans le domaine de l'imagerie en milieu complexe.

## 4 Cas des surfaces de pentes modérées

Quand on mesure le profil d'une surface rugueuse à l'AFM, on constate la plupart des échantillons présentent des pentes qui dépassent rarement les 20%. Il est donc intéressant d'étudier plus précisément le cas des surfaces rugueuses de pente modérée en raison du fait qu'il correspond à une majorité d'échantillons. L'autre raison qui rend ce cas intéressant est, comme nous allons le voir, le fait que la diffusion par ce type de surfaces peut être annulée efficacement, tout en utilisant un dispositif similaire à celui qui est utilisé dans le cas des faibles rugosités.

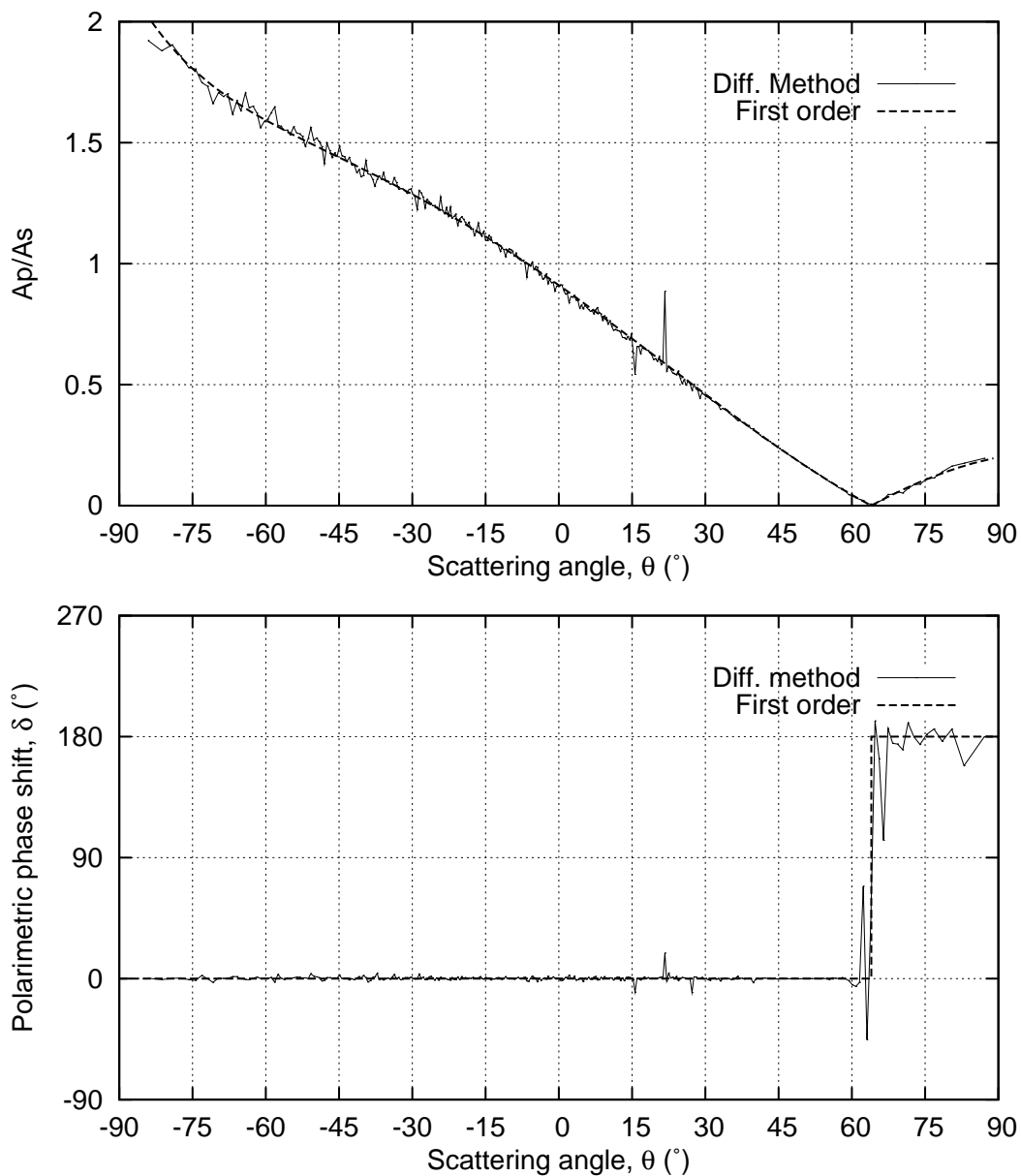
### 4.1 Différence entre une surface de faible pente et une surface de forte pente pour une même rugosité

La figure 2.3 présente le calcul du déphasage polarimétrique et du rapport  $|A_p|/|A_s|$  dans les mêmes conditions que pour la figure 2.2, mais cette fois pour une faible pente :  $w = 2\%$ , soit  $1,15^\circ$ . Bien que la rugosité soit, la même,  $R_q = 100$  nm, les oscillations sont minimales par rapport au cas de la surface de forte pente.

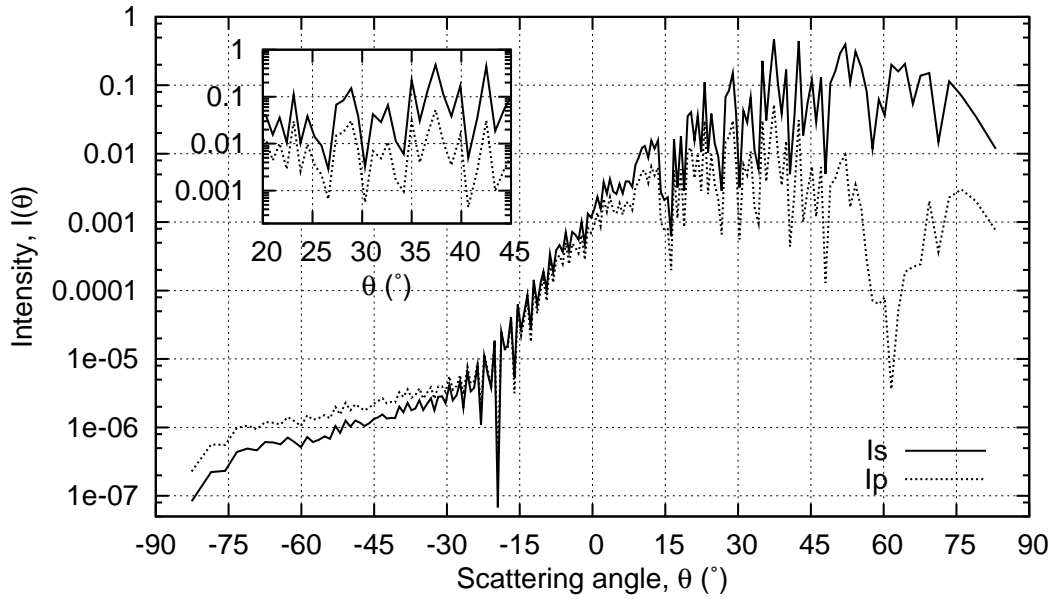
L'influence de la pente dans l'amplitude des oscillations du déphasage polarimétrique à l'échelle du speckle a déjà été mise en évidence dans [10] et nous montrons ici qu'il en va de même pour le rapport  $|A_p|/|A_s|$ .

En plus de présenter peu d'oscillations, on constate que les résultats présentés fig. 2.3 sont proches de ceux prédits par la théorie du premier ordre.

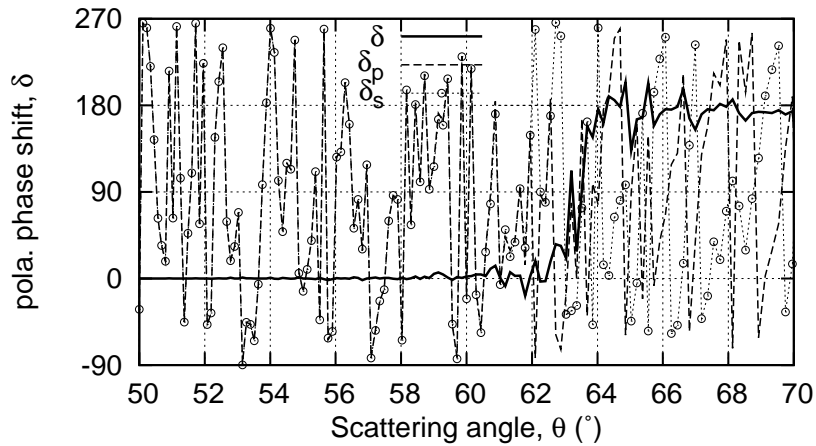
Le fait que la direction de la polarisation ( $\Leftrightarrow |A_p|/|A_s|$ ) et que son ellipticité ( $\Leftrightarrow \delta$ ) varient peu à l'échelle du speckle ne signifient pas nécessairement qu'il en est de même pour l'intensité. Si on prend, par exemple, une surface rugueuse de pente 15% et de rugosité 500 nm, on observe (Fig. 2.4) que les intensités, en polarisation s et p, varient avec une amplitude importante ( $\sim 1$  décade) à l'échelle angulaire du speckle. Par contre quand on observe le détails de ces variations, on constate que les oscillations de la composante s et de la composante p sont fortement corrélées à l'échelle du speckle. Ce comportement est très intéressant et explique que le rapport  $|A_p|/|A_s|$  varie peu d'un grain de speckle à l'autre.



**Figure 2.3** Paramètres ellipsométriques  $|A_p|/|A_s|$  et  $\delta$  du champ diffusé par une surface rugueuse de faible pente ( $w = 2\%$ , soit  $1,15^\circ$ ) et pour une rugosité de 100 nm. Mêmes conditions d'éclairement et même indice de réfraction que pour la figure 2.2.



**Figure 2.4** Intensités diffusées en polarisations s et p par une surface rugueuse de pente modérée ( $w = 15\%$ ) et de rugosité égale à 500 nm. Mêmes conditions d'éclairage et même indice de réfraction que pour la figure 2.2



**Figure 2.5** Calculs des déphasage des composantes s et p et du déphasage polarimétrique pour une surface de verre de 100 nm de rugosité et une pente de 10%.

Nos simulations montrent qu'il en va de même pour le déphasage : les déphasages  $\delta_p$  et  $\delta_s$  varient de façon importante mais corrélée, et ses variations se compensent pour le déphasage polarimétrique  $\delta = \delta_p - \delta_s$  qui varie faiblement à l'échelle angulaire du speckle (Fig. 2.5).

Le champ diffusé par des surfaces de pentes modérées présente donc des



paramètres ellipsométriques qui varient lentement à l'échelle angulaire (cf. Fig 2.3 ou 2.7).

Ce point constitue une différence importante avec les surfaces de forte pente pour lesquelles on observe que les variations rapides ne sont pas corrélées entre  $s$  et  $p$ , ce qui conduit à des variations importantes du rapport  $|A_p|/|A_s|$  et de  $\delta$  à l'échelle du speckle (cf. Fig. 2.2).

## 4.2 Influence de la rugosité pour une pente modérée

La figure 2.6 montre l'évolution du rapport  $|A_p|/|A_s|$ , tracé en fonction de  $\theta$ , pour des surfaces de même pente  $w = 15\%$  et de rugosité croissante.

Afin d'utiliser une topographie réaliste, les profils utilisés pour les simulations de la figure 2.6, de même que les autres profils utilisés dans ce chapitre, ont été obtenus à partir du profil réel d'une surface de verre rugueux mesurée par AFM. La rugosité de cette surface était de 125 nm et sa pente de 11,7%. Les profils correspondant aux différentes pentes et rugosités, ont ensuite été obtenus par ajustement de l'échelle de cette surface.

Les rapports  $|A_p|/|A_s|$  obtenus par la théorie du premier ordre et par le modèle des réflexions locales sont également représentés figure 2.6.

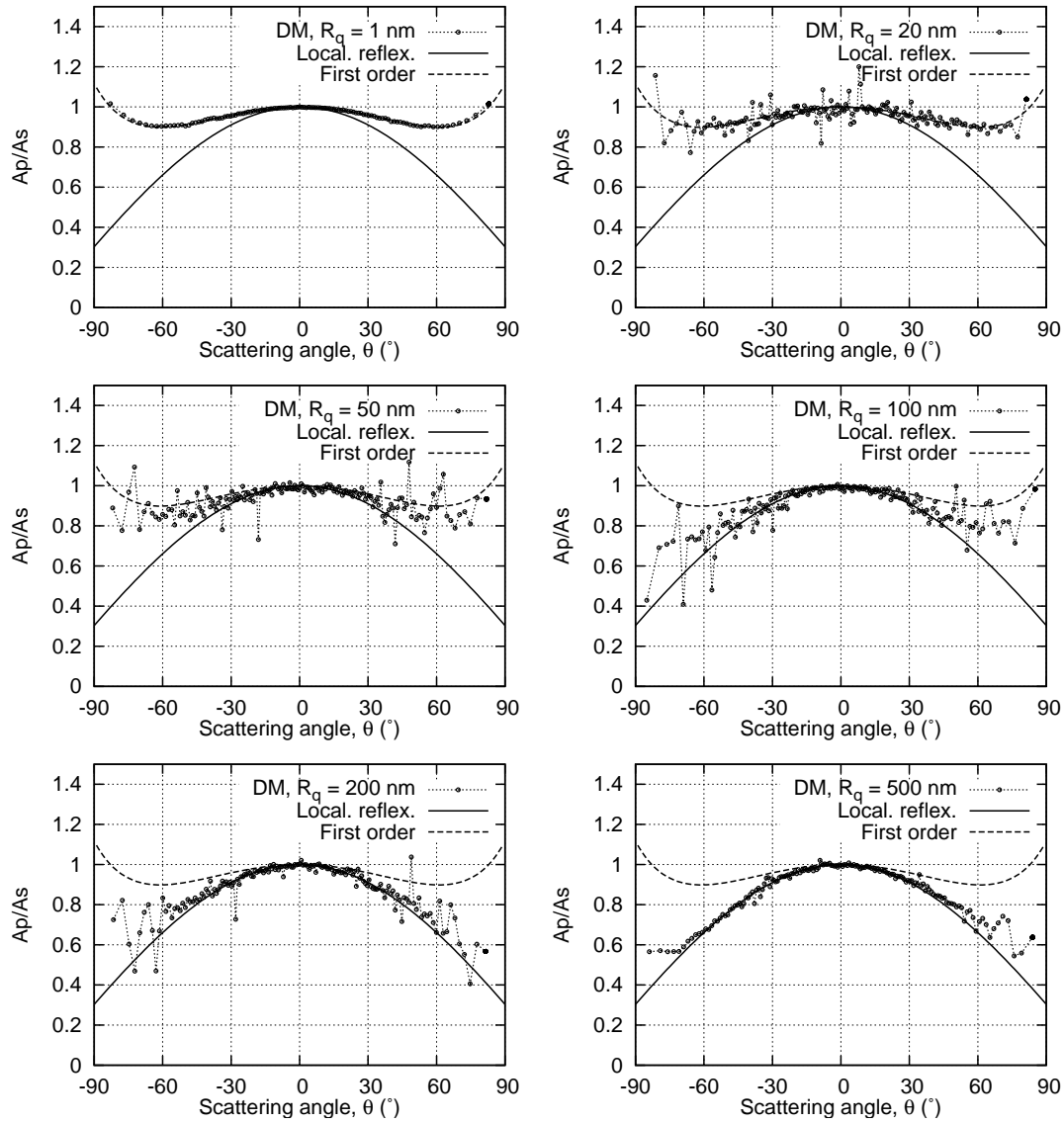
Les rugosités varient de  $R_q = 1$  nm, qui correspond à la rugosité d'un verre super-poli à  $R_q = 500$  nm, une rugosité de l'ordre de la longueur d'onde, pour laquelle la lumière est totalement diffusée (absence totale de spéculaire).

Lorsque la rugosité est faible ( $R_q = 1$  nm) les résultats sont en parfait accord avec ceux de la théorie du premier ordre. Quand la rugosité augmente ( $R_q = 20$  nm), on observe l'apparition de variations rapides, mais d'amplitude limitée, du rapport  $|A_p|/|A_s|$ . Quand on augmente encore la rugosité ( $R_q$  de 50 à 500 nm) on observe que les oscillations n'augmentent pas d'amplitude ; on observe également que la position moyenne de la courbe se déplace progressivement de la position correspondant à la théorie du premier ordre vers celle correspondant au modèle des réflexions locales.

Ces résultats sont intéressants à plusieurs niveaux.

Tout d'abord les trois théories utilisées pour le calcul des paramètres du champ diffusé sont en accord, ce qui montre la cohérence de notre modélisation : les résultats de la méthode différentielle tendent vers ceux de la théorie du premier ordre pour les faibles rugosités et vers ceux du modèle des réflexions locales pour les grandes rugosités qui correspondent aussi à des grandes longueurs de corrélation puisque la pente est fixée. Pour une raison de durée des calculs, la méthode différentielle est ici utilisée en considérant une invariance de la structure selon la direction  $y$ . On constate que même avec cette approximation les résultats sont cohérents avec ceux des deux autres théories qui ne font pas cette hypothèse <sup>3</sup>.

<sup>3</sup>L'influence de cette hypothèse d'invariance selon  $y$  pourrait également être étudiée à



**Figure 2.6** Evolution du rapport  $|A_p|/|A_s|$  en fonction de la rugosité, dans le cas d'une surface de pente 15%. Incidence normale, longueur d'onde de 632,8 nm, indice de réfraction égal à 1,5.

Un autre résultat intéressant est le fait que les oscillations restent d'amplitude limitée quel que soit la rugosité. Quand la rugosité augmente, on s'éloigne progressivement du domaine de validité de la théorie du premier ordre qui ne prévoit aucune oscillations, mais, puisque la longueur de corrélation augmente également quand la pente est fixée, on se rapproche de celui du modèle des réflexions locales qui ne prévoit également aucune oscillation. Ceci explique que les oscillations restent bornées quand la pente est modérée.

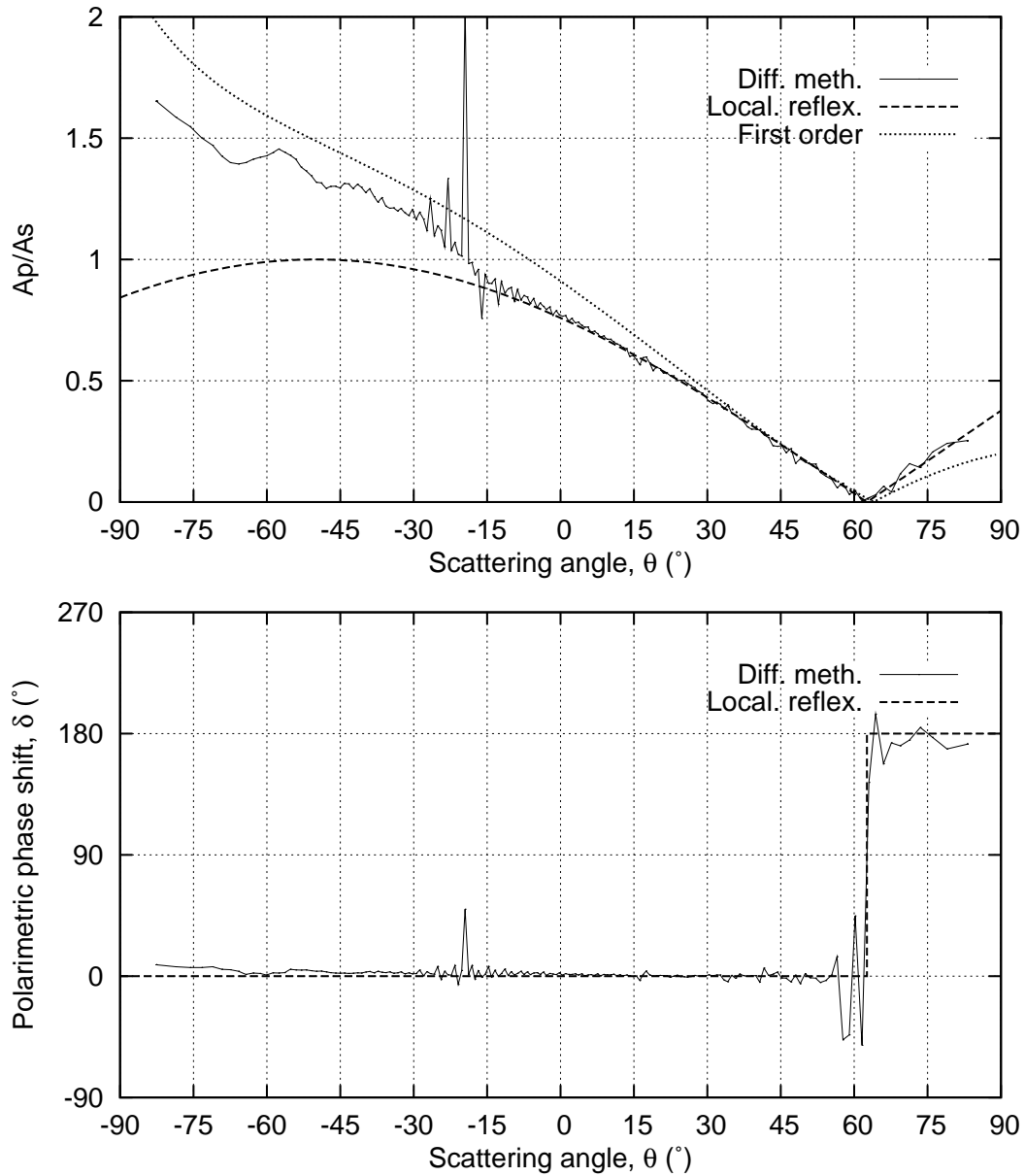
Remarquons que, toujours dans le but de limiter la durée de calcul, les simulations ont été effectuées pour des longueurs limitées à 50-100 microns, ce qui est inférieur aux diamètres des faisceaux habituellement utilisés. Il se peut que la longueur ait une influence sur l'amplitude des oscillations mais les essais que nous avons fait à ce sujet, ne nous ont pas permis de conclure de façon claire.

Le déphasage polarimétrique présente le même comportement (cf. chapitre précédent et [10]) : les oscillations autour de la valeur moyenne sont d'amplitude limitée tant que la pente est modérée.

Les résultats présentés figure 2.6 concernent une incidence normale et on peut obtenir des résultats semblables pour une autre incidence. La figure 2.7 présente par exemple les variations en fonction de  $\theta$  du rapport  $|A_p|/|A_s|$  et du déphasage polarimétrique pour une incidence de  $50^\circ$ , dans le cas de la surface de rugosité 500 nm et de pente 15%, dont l'intensité diffusée est présentée figure 2.4. On constate que, lorsque l'angle de diffusion est supérieur à environ  $-10^\circ$ , les paramètres ellipsométriques du champ diffusé par cette surface sont très proches de ceux correspondant au modèle des réflexions locales. Lorsque l'angle de diffusion est inférieur à environ  $-10^\circ$ , le rapport  $|A_p|/|A_s|$  n'est plus en accord avec les résultats du modèle des réflexions locales. Ceci n'est pas étonnant car, d'une part la lumière diffusée loin du spéculaire correspond aux fréquences spatiales élevée de la surface, incompatibles avec l'hypothèse d'une grande longueur de corrélation, d'autre part comme la pente est modérée, le modèle de réflexion locale ne prévoit de la lumière que dans une certaine zone angulaire autour du spéculaire, au delà, la lumière diffusée ne peut être due qu'à la diffraction. Quoi qu'il en soit, l'intensité est faible dans la zone où l'accord n'est pas très bon, et ceci est peu gênant pour l'annulation. Le déphasage polarimétrique est également proche de celui prédit par le modèle des réflexions locales, sauf au niveau du saut de phase où des oscillations d'amplitude assez importantes sont présentes. Ceci devrait être également peu gênant pour l'annulation, puisque cela correspond à un angle de diffusion où la composante  $A_p$  est proche de zéro, et donc pour lequel le champ reste presque linéaire est parallèle à  $A_s$  quelque soit la valeur du déphasage.

---

l'aide de la méthode différentielle tridimensionnelle, présentée au chapitre 4 de la première partie, en utilisant des paramètres  $N_x$  et  $N_y$  différents.



**Figure 2.7** Paramètres ellipsométriques  $|A_p/A_s|$  et  $\delta$  du champ diffusé par une surface rugueuse de pente 15% et de rugosité de 500 nm. Paramètres identiques à ceux de la figure 2.4.

Ces résultats sont très encourageants pour l'annulation de la diffusion par des surfaces rugueuses de pente modérée. Puisque les paramètres ellipsométriques du champ diffusé varient peu à l'échelle du grain de speckle il n'est pas nécessaire d'utiliser un dispositif permettant l'ajustement des paramètres d'annulation pour chaque grain de speckle et surtout, il n'est pas nécessaire de connaître à priori la topologie de la surface concernée.

### 4.3 Exemple d'annulation

Un exemple d'annulation de la lumière diffusée par une surface de pente modérée est présenté figure 2.8.

La surface rugueuse considérée est celle dont l'intensité et les paramètres ellipsométriques du champ diffusé sont représentés figures 2.4 et 2.7 respectivement. Sa pente est de 15% et sa rugosité de 500 nm.

Le champ incident est choisi polarisé linéairement à 45° de la direction  $s$  et avec une incidence de 50°. Les paramètres d'annulation, angle de l'analyseur  $\psi$  et retard de phase  $\eta$ , sont obtenus par le modèle des réflexions locales et sont représentés figure 2.8.

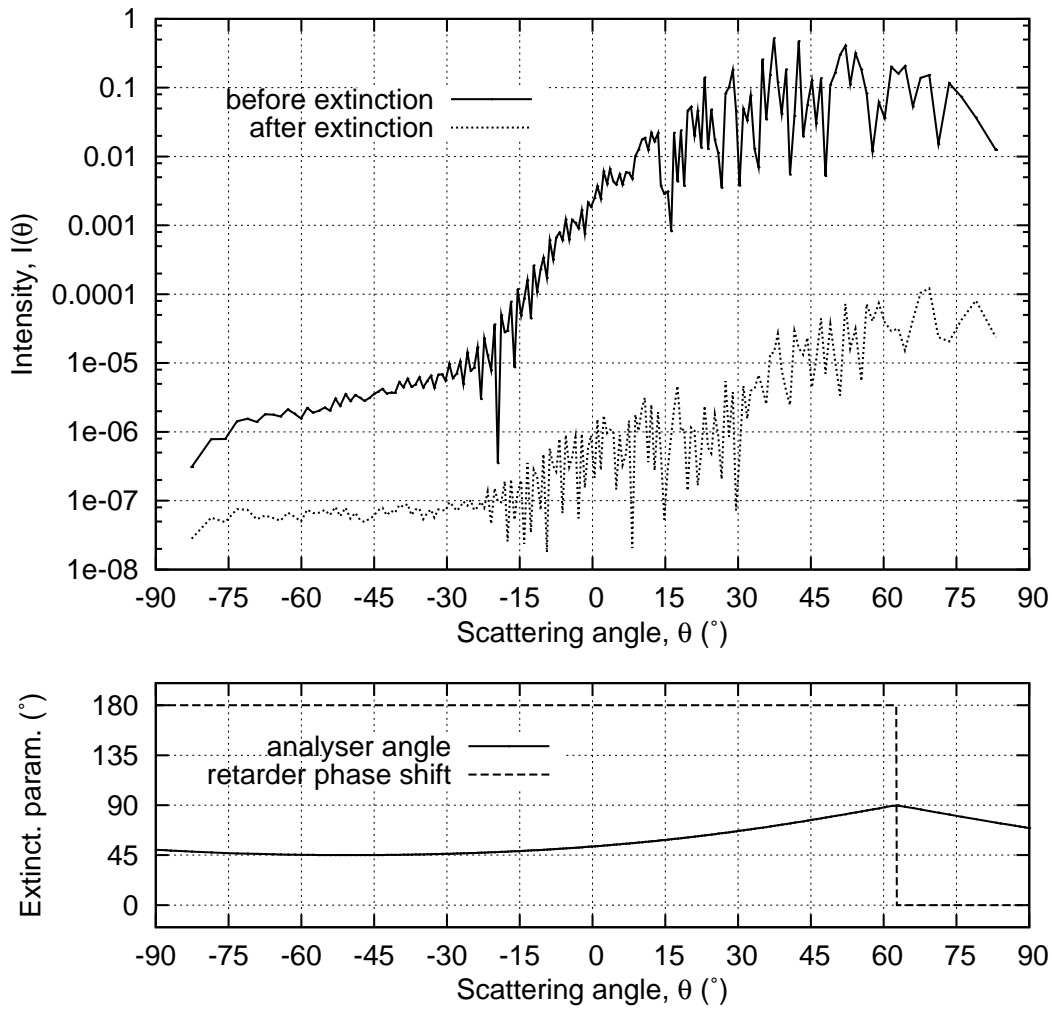
Les intensités avant et après annulation sont représentées en échelle logarithmique. L'intensité après passage par le retardateur et projection sur l'analyseur est obtenue par la relation

$$I_{\text{annul}} \propto \cos^2 \psi (A_s^2 + \tan^2 \psi A_p^2 + 2|A_s A_p| \tan \psi \cos(\delta + \eta)). \quad (2.27)$$

On constate une forte atténuation de la diffusion après le dispositif d'annulation : le rapport entre l'intensité totale (intégrée de  $-90^\circ$  à  $90^\circ$ ) après et avant annulation est égal à  $2,8.10^{-4}$ .

Ce résultat est très satisfaisant et est encourageant en vue des applications à l'imagerie d'objets situés sous une surface fortement diffusante et de pente modérée.

Cependant, si en plus de la surface rugueuse, une deuxième source de diffusion est présente et que l'on souhaite mettre en valeur son signal à l'aide de la procédure d'annulation, il faut que les paramètres ellipsométriques du champ qu'elle diffuse soient nettement différents de ceux du champ diffusé par la surface ; sinon la procédure d'annulation atténuera également le signal intéressant. Les résultats du chapitre précédent montrent qu'en dehors des surfaces rugueuses et des milieux très faiblement hétérogènes, le déphasage polarimétrique présente généralement des oscillations assez marquées et nous pouvons supposer qu'il en va de même pour le rapport  $|A_p|/|A_s|$ . Ceci signifie que dans la plupart des cas où une autre source de diffusion est présente, on devrait être en mesure d'augmenter efficacement le contraste de son signal.



**Figure 2.8** Annulation de la diffusion par une surface de pente 15% et de rugosité 500 nm. En haut : intensités avant et après annulation. En bas : paramètres d'annulation obtenus à partir du modèle des réflexions locales. Le rapport entre l'intensité totale diffusée après annulation et avant annulation est  $\sim 2,8 \cdot 10^{-4}$ . Le champ incident est polarisé linéairement à  $45^\circ$  de la direction  $s$ , à une incidence de  $45^\circ$  et une longueur d'onde de 632,8 nm. Les paramètres de la surfaces sont identiques à ceux des figures 2.4 et 2.7.

Remarquons enfin que même si on obtient un contraste élevé, le signal que l'on a isolé est déformé puisqu'il est passé à travers le retardateur et l'analyseur. Il semble cependant envisageable de le reconstituer, en réalisant plusieurs mesures correspondant à des paramètres différents du champ incident, par exemple en faisant varier l'angle de la polarisation, puis en en déduisant les paramètres  $|A_s|$ ,  $|A_p|$  et  $\delta$  du champ qui nous intéressent par résolution du système d'équations constitué par les différentes mesures.

# Chapitre 3

## Application à la métrologie en microélectronique

Une des applications intéressantes des calculs de diffraction est leur utilisation pour la résolution de problèmes inverses, c'est à dire la reconstruction d'une structure inconnue ou partiellement connue à partir du champ électromagnétique qu'elle diffracte.

Ces techniques de reconstruction peuvent par exemple être utilisées pour la détection de mines enfouies, la détection de cavités ou d'inclusions dans un matériau.

L'institut Fresnel possède depuis plusieurs années une expertise dans ces techniques, aussi bien en optique [72, 73, 74], que dans le domaine micro-ondes [75].

L'industrie de la microélectronique, utilise depuis peu ces techniques inverses, pour la métrologie de composants en cours de fabrication ; elles font partie des méthodes actuellement les plus précises, capables de mesurer des dimensions latérales inférieures à 100 nm avec une répétabilité de l'ordre du nanomètre. Nous présentons dans ce chapitre les nouvelles possibilités offertes pour l'analyse de ces structures.

### 1 Contexte : l'industrie de la microélectronique

#### 1.1 Un secteur en constante évolution

En 1971, le processeur Intel 4004 était composé de 2300 transistors en technologie 10  $\mu\text{m}$ . En 2007 les processeurs quad core Xeon, commercialisés par Intel, contiennent 582 millions de transistors en technologie 65 nm.

Cette croissance exponentielle du nombre de transistors dans les processeurs a été prédite par Moore en 1965 [76], puis rectifiée en 1975 <sup>1</sup>, pour aboutir

---

<sup>1</sup>La période de doublement avait initialement été énoncée à 1 an.



à la fameuse loi de Moore qui stipule un doublement du nombre de transistors tous les deux ans <sup>2</sup>. Cette loi empirique s'est avérée particulièrement exacte depuis.

Cet accroissement du nombre de composants est intimement lié à la réduction de leurs dimensions. La demi période des mémoires DRAM <sup>3</sup> de la génération actuelle est de seulement 65 nm et doit descendre à 45 nm pour la prochaine génération ( $\sim 2010$ ).

Le passage d'une génération à une autre demande un effort scientifique et technologique colossal et se traduit par un accroissement exponentiel du coût des lignes de fabrication. La loi de Rock, un équivalent à la loi de Moore du point de vue économique, stipule un doublement du coût d'une ligne de fabrication tous les 4 ans. Le coût d'une ligne de fabrication était par exemple de 1,5 milliards de dollars en 2000 pour une usine fabricant des plaques de 200 mm, de 2,5 milliards de dollars en 2003 pour une usine fabriquant des plaques de 300 mm et devrait être d'environ 6 milliards de dollars pour une usine fabriquant des plaques de 450 mm <sup>4</sup> autour de 2010.

A ces échelles, seuls les plus grands groupes sont capables de mettre en oeuvre les investissements nécessaires et un certain nombre d'entre eux, faute d'avoir la taille critique, disparaissent du secteur, ou sont absorbés par d'autres groupes. Certains fabricants répondent également à ces contraintes en mutualisant leur moyens, c'est le cas par exemple du centre de recherche commun créé à Crolles 2 en 2003 par ST Microelectronics, Philipps, et Motorola.

Pour poser les principaux jalons de cette évolution, des experts parmi les industriels de la microélectronique, les équipementiers et les chercheurs, se réunissent chaque année pour éditer un rapport technique : l'ITRS ou *International Technology Roadmap for Semiconductors*. Ce rapport contient une feuille de route détaillée des technologies à mettre en œuvre dans les prochaines années. Les objectifs concernant le design des circuits, les nouveaux matériaux, les techniques de fabrication, de métrologie, l'impact sur l'environnement, etc., sont définis pour les 15 années à venir.

Le tableau 3.1 présente un extrait de l'ITRS 2007. Il faudra par exemple être capable en 2010 de fabriquer une ligne isolée de 18 nm et de la mesurer avec une précision de 0,37 nm.

---

<sup>2</sup>Cette loi est souvent incorrectement énoncée avec une période de 18 mois.

<sup>3</sup>La demi période des mémoires DRAM (*Dynamic Range Acces Memory*) est généralement utilisée comme longueur de référence d'une génération technologique donnée.

<sup>4</sup>L'augmentation du diamètre des plaques est une façon d'accroître la productivité. Une plaque de 300 mm permet de fabriquer deux fois plus de puces qu'une plaque de 200 mm pour un même nombre d'opérations. L'accroissement du diamètre des plaques pose également un défi technologique supplémentaire puisqu'il est nécessaire que les procédés soient parfaitement homogènes sur toute la surface.

Année	2007	2010	2013	2016	2019
<b>Dimensions caractéristiques</b>					
Noeud technologique (nm)	65	45	32	22	16
L. grille transistor gravé (nm)	25	18	13	9	6,3
<b>Contraintes métrologiques</b>					
Précision CD ligne isolée (nm)	0,52	0,37	0,27	0,19	0,12
Précision CD lignes denses (nm)	1,26	0,84	0,58	0,42	0,33

**Tableau 3.1** Estimations, extraites du rapport de l'ITRS 2007, de quelques dimensions caractéristiques et contraintes métrologiques associées aux futurs nœuds technologiques [77].

## 1.2 Principe de fabrication des composants microélectroniques

Les puces sont fabriquées par plaques (*Wafers* en anglais) dont le diamètre est actuellement de 300 mm (8 pouces) sur le site ST Microelectronics de Rousset. Chaque plaque contient plusieurs centaines de puces (le nombre exact dépendant de leur taille).

Le nombre d'étapes de fabrication, de la plaque brute de silicium jusqu'aux puces entièrement gravées, est actuellement d'environ un millier. Ce nombre augmente à chaque nœud technologique.

### Niveaux de fabrication

Les étapes de fabrications sont habituellement classées en trois niveaux :

- Le niveau *Front-End*, qui concerne les premières étapes, celles de fabrications des composants actifs (transistors).
- Le niveau *Back-End*, qui concerne la réalisation des interconnexions entre les transistors ainsi que de certains composants passifs.
- Le *Packaging*, qui concerne la mise en boîtier de la puce et la réalisation des connections avec l'extérieur.

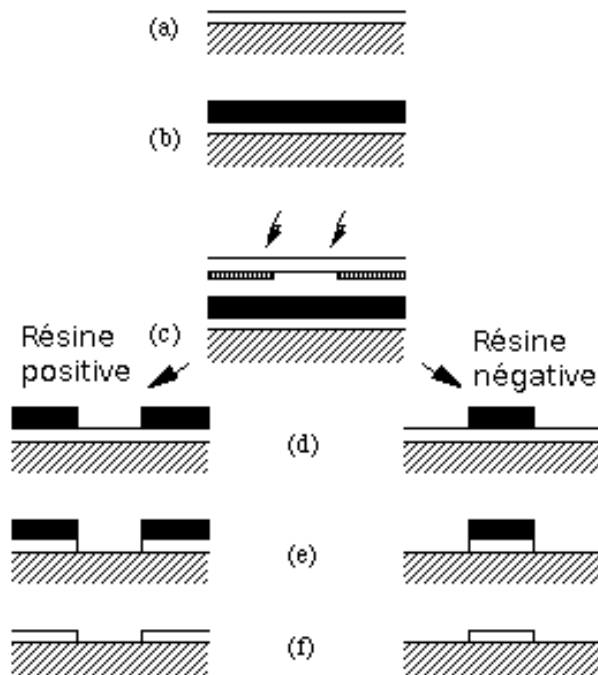
Les premières étapes sont les plus critiques, en raison de la finesse de gravure qu'elles demandent, et sont en conséquence l'objet d'une attention accrue de la part de la métrologie.

### La photolithographie

Le procédé permettant de structurer la plaque à l'échelle sub-micrométrique est la photolithographie (Fig. 1.2).

De façon simplifiée, la photolithographie, consiste essentiellement en les étapes suivantes :

- Une couche mince du matériau à graver est déposée sur la plaque.



**Figure 3.1** Principe de base de la photolithographie :

(a) Dépôt du matériau sur le substrat

(b) Dépôt d'une couche de résine photosensible

(c) Insolation par projection de l'image d'un masque sur la résine

(d) Développement de la résine

(e) Gravure de la couche

(f) Retrait de la résine

- Une couche de résine photosensible est déposée sur le matériau.
- Le motif à graver est projeté optiquement (dans l'U.V.) sur la résine, à partir d'un masque de gravure.
- La résine est développée chimiquement. Si la résine est positive, la partie insolée est éliminée au développement, si elle est négative, c'est la partie non insolée qui est éliminée.
- Le matériau est gravé : la partie de la couche mince non protégée par la résine est éliminée.
- Le reste de résine est éliminé.

Plusieurs étapes de photolithographie sont nécessaires pour réaliser les transistors, puis l'ensemble des interconnexions. D'autres étapes de fabrication, le dopage par exemple, s'ajoutent également aux étapes de photolithographie.

### 1.3 Métrologie des composants microélectroniques

#### Métrologie en ligne ou hors ligne de fabrication

Deux types de métrologie sont principalement utilisés dans une usine de composants microélectroniques :

- La métrologie en ligne de production (*inline*) : l'appareil de mesure est présent en salle blanche (la *fab*) et fait partie intégrante de la chaîne de fabrication. Les lots sont mesurés entre deux étapes données de leur fabrication.
- La métrologie hors ligne de production (*offline*) : les appareils de mesure

sont en dehors de la salle blanche de fabrication. Les plaques doivent donc être sorties de la chaîne de fabrication avant d'être mesurées et sont parfois détruites lors de la mesure. Ces mesures peuvent être utilisées pour l'étalonnage d'appareils de production ou le développement de nouvelles méthodes de fabrication.

La technique qui nous intéresse est essentiellement utilisée pour la métrologie en ligne.

### **Utilité de la métrologie en ligne**

La métrologie en ligne permet d'avoir un retour sur l'étape de fabrication qui vient d'être réalisée sur la plaque. Ce retour est d'autant plus nécessaire que les techniques de fabrication sont généralement des techniques de pointe dont la maîtrise est souvent délicate.

D'une part, grâce à une boucle de rétroaction entre les appareils de mesure et les appareil de fabrication, la métrologie permet de stabiliser les propriétés des lots fabriqués. Une correction des paramètres de fabrication est effectuée pour chaque lot, en fonction des propriétés mesurées sur le lot précédent.

D'autre part, la métrologie permet de détecter les lots hors spécifications qui conduiraient à des circuits non fonctionnels. Dans certains cas, l'étape de fabrication peut être recommencée <sup>5</sup>, afin de corriger les défauts constatés. Dans le cas où l'étape de fabrication n'est pas réversible, la fabrication du lot est interrompue. Chaque étape ayant un coût élevé, ceci permet d'économiser les étapes ultérieures de fabrication.

### **Principaux appareils utilisés pour la mesure de dimensions critiques**

**Le microscope électronique à balayage (CD-SEM)** est un des principaux outils actuellement utilisé pour la mesure de dimensions critiques en ligne de production. Le CD-SEM présente l'avantage de pouvoir effectuer la mesure à n'importe quel endroit du circuit, d'être d'un emploi dépendant peu de l'objet que l'on souhaite mesurer et de fournir à l'utilisateur une image directe de cet objet.

Par contre les CD-SEM sont actuellement à leur limite en terme de répétabilité de mesure par rapport aux normes fixées par l'ITRF pour la génération 65 nm. De plus, le faisceau d'électrons charge la résine photosensible, ce qui a pour effet de la contracter donc de fausser la mesure et de provoquer une légère détérioration. Les CD-SEM sont également intrinsèquement limités à une vue aérienne en deux dimensions de la structure <sup>6</sup>.

---

<sup>5</sup>Par exemple lors de la lithographie, si le motif déposé n'est pas satisfaisant après le développement de la résine, il est possible de retirer la résine sans endommager le reste de la plaque et de recommencer entièrement les étapes de la photolithographie.

<sup>6</sup>Un autre type de microscope électronique à balayage, le XSEM (Cross section SEM), peut

**Le microscope à force atomique (AFM).** Cet appareil présente l'avantage d'une vue en trois dimensions de la structure, avec, moyennant l'emploi de pointes adaptées, une grande précision et une grande répétabilité.

Par contre la durée de la mesure est beaucoup trop longue pour être compatible avec une utilisation systématique en production et l'appareil demande une maintenance (calibration, changement des pointes) importante. Il est surtout utilisé comme instrument de référence permettant l'étalonnage des autres appareils.

**Les techniques optiques** qui étaient au départ utilisées principalement pour les mesures d'épaisseur de couches minces se généralisent à présent pour les mesures de CD (*scatterometry*). L'appareil de mesure est généralement un ellipsomètre spectroscopique associé à un ordinateur. Ces techniques de mesures sont des techniques inverses, c'est à dire que le spectre mesuré est comparé aux résultats issus d'un modèle afin d'en déduire la valeur des paramètres recherchés. Ces techniques présentent l'avantage d'être rapides, non destructives et d'avoir une grande répétabilité. De plus la reconstruction de la structure donne des informations supplémentaires (hauteur de la ligne, pente des parois, composition) par rapport à une mesure par CD-SEM.

Par contre la *scatterometry* demande de recourir à une modélisation complexe de la diffraction par la structure et chaque type de structure étudiée demande une adaptation des paramètres de la reconstruction, ce qui est coûteux en temps, tout en demandant des personnes hautement qualifiées. Contrairement au CD-SEM, la mesure n'est pas effectuée sur la puce elle même mais sur une structure de test placée à côté de la puce <sup>7</sup>.

## 2 Reconstruction du profil à partir de mesures ellipsométriques

### 2.1 Résolution du problème inverse de diffraction

#### Principe de la résolution du problème inverse de diffraction

On appelle *problème direct*, la détermination du champ diffracté par une structure et des conditions d'éclairement connues. La résolution de ce pro-

être utilisé hors-ligne, pour obtenir, après clivage de la plaque, une vue du profil de la structure.

<sup>7</sup>Un grand nombre de structures de test est présent sur la ligne de découpe entre deux puces (*scribeline*) afin de permettre ou de faciliter certaines mesures. Les éléments présents sur ces structures de test et ceux présents sur la puce étant fabriqués lors des même étapes, ils présentent des propriétés identiques. Les structures de test de *scatterometry* sont des réseaux dont la dimension totale est de  $50 \times 50 \mu\text{m}$ . D'autres structures de test sont également présentes, par exemple pour les mesures d'épaisseurs ou d'indice de réfraction des matériaux.

blème est l'objet de la première partie de ce manuscrit.

On appelle *problème inverse* la détermination de la structure (forme, indice de réfraction, etc.) à partir de la mesure du champ diffracté, les conditions d'éclairement étant généralement connues.

En général la résolution du problème inverse est beaucoup plus difficile que celle du problème direct.

Dans certains cas particuliers il est possible d'inverser les équations du problème direct pour obtenir l'expression des propriétés de la structure en fonction du champ diffracté. C'est par exemple le cas avec la théorie du premier ordre, qui s'applique au cas des faibles amplitudes de modulation et pour laquelle la topographie de la surface peut être obtenue à l'aide d'une transformation de Fourier inverse du champ diffracté.

### Résolution du problème inverse par minimisation d'une fonction de mérite

Pour la méthode différentielle, comme pour l'ensemble des méthodes permettant de calculer la diffraction par les structures rencontrées en microélectronique, aucune façon d'inverser l'algorithme directe n'est connue.

La résolution du problème inverse se fait donc par utilisation de la méthode directe. Les résultats expérimentaux sont comparés à ceux obtenus par le calcul de la diffraction par une structure modélisant la structure mesurée. Un algorithme d'optimisation est ensuite utilisé pour ajuster les paramètres de la structure modèle jusqu'à minimiser l'écart entre valeurs expérimentales et calculées.

Les données expérimentales sont en général constituées de l'intensité et du déphasage polarimétrique de l'ordre 0 pour un ensemble de longueurs d'onde ou un ensemble d'angles d'incidence.

L'écart entre les valeurs expérimentales et les valeurs déterminées par le calcul est mesuré par une fonction de mérite.

La minimisation de la fonction de mérite se fait à l'aide d'un algorithme d'optimisation qui effectue plusieurs itérations jusqu'à converger vers des paramètres qui correspondent à un minimum. Pour nos programmes, nous avons utilisé l'algorithme Levenberg-Marquardt [78] fourni par la librairie levmar, puis l'algorithme BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) [79] fourni par la librairie GSL [20]. Ces algorithmes performants convergent plus rapidement que des méthodes plus élémentaires, telle que la méthode du simplex, ce qui permet de diminuer la durée de calcul de la reconstruction.

Nous définissons la fonction de mérite  $\chi^2$  comme l'écart quadratique moyen entre les valeurs mesurées et les valeurs calculées

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f_{\text{mes}}(i) - f_{\text{cal}}(i))^2, \quad (3.1)$$

où  $i$  désigne un point de mesure, intensité ou déphasage polarimétrique, correspondant à une longueur d'onde ou un angle d'incidence particulier<sup>8</sup>.

### Unicité de la solution

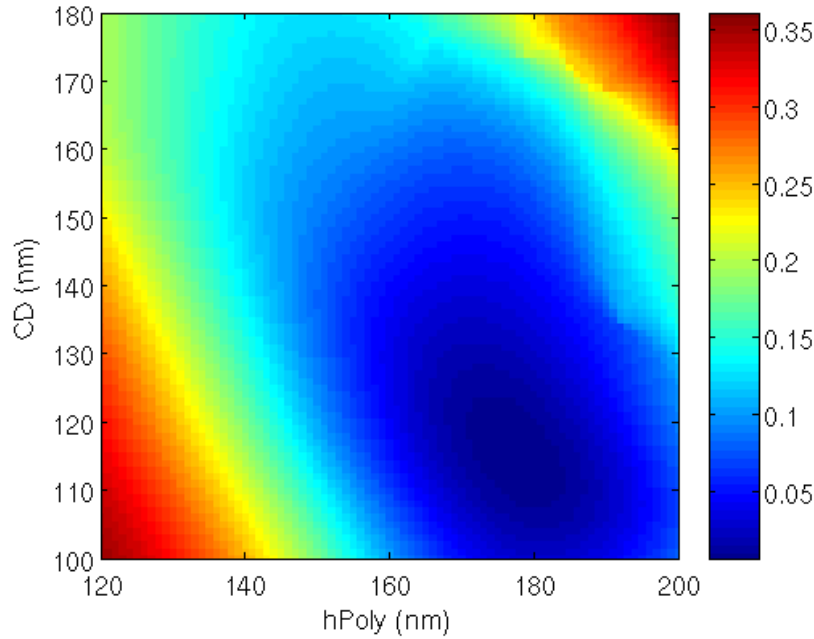
La question de l'unicité de la solution peut se poser sous deux aspects.

D'une part, savoir si deux structures différentes peuvent conduire au même résultat expérimental. A priori, oui. Cela dépend en particulier du nombre de mesures que l'on fait. Si la signature expérimentale est obtenue pour un nombre de points limité, on peut s'attendre à ce qu'un grand nombre de structures différentes puissent correspondre à cette signature. La résolution du problème inverse consiste à transformer l'information qui est présente dans la mesure en information concernant la définition de la structure, mais ne pourra pas créer de l'information qui n'était pas présente au départ. Si on veut diminuer le nombre de structures potentielles dont la signature correspond à celle mesurée, il faudra augmenter le nombre de mesures (par exemple mesurer le déphasage en plus de l'intensité, faire varier l'angle d'incidence en plus de la longueur d'onde, etc.) En pratique, pour s'affranchir en grande partie de ce problème, la technique de *scatterometry* ne considère pas une structure a priori totalement inconnue au départ, mais postule une certaine forme avec certain nombre de paramètres libres de varier, et se base sur un nombre de points expérimentaux nettement supérieur au nombre des paramètres.

Un autre aspect du problème de l'unicité est celui de la présence d'éventuels minima locaux dans la fonction de mérite. Une adéquation parfaite entre les calculs et les résultats expérimentaux conduirait à une valeur nulle de la fonction de mérite. En pratique on recherche le minimum de la fonction de mérite dans une fenêtre de variation donnée. Peu de méthodes d'optimisation sont capables de s'affranchir des minimum locaux<sup>9</sup> et ces techniques sont trop lentes pour être utilisées dans un contexte de production en microélectronique. D'éventuels minima locaux peuvent-être mis en évidence par une cartographie systématique de la fonction de mérite dans la zone de variation autorisée des paramètres. Une telle étude ne peut cependant pas être systématique, car longue à réaliser. La figure 3.2 représente la valeur de la fonction de mérite (eq. 3.1), dans le cas d'un réseau lamellaire pour deux paramètres (largeur et hauteur du motif). Dans cet exemple on constate qu'il n'y a qu'un seul

<sup>8</sup> Notons que le fait d'attribuer un poids identique à chaque point de mesure ne va pas de soi, nous pourrions par exemple supposer que les mesures du déphasage polarimétrique sont plus importantes pour la reconstruction que celles de l'intensité ou bien que les mesures effectuées aux faibles longueurs d'onde sont plus importantes que celles effectuées aux grandes longueurs d'onde. Cependant, en l'absence d'une étude détaillée sur ce point, nous considérons un poids identique pour chaque point de mesure.

<sup>9</sup> On peut citer par exemple la méthode du recuit simulé et les algorithmes génétiques, parmi les méthodes d'optimisation pouvant en partie s'affranchir de la présence de minima locaux.



**Figure 3.2** Cartographie de la fonction de mérite  $\chi^2$ , en fonction de deux paramètres d'une structure lamellaire définie figure 3.8. Un minimum unique est observé pour les valeurs :  $CD = 115$  nm et  $h_{\text{Polysilicium}} = 179$  nm.

minimum. Ceci étant, la présence de plusieurs minima locaux ne semble pas pouvoir être exclue en général.

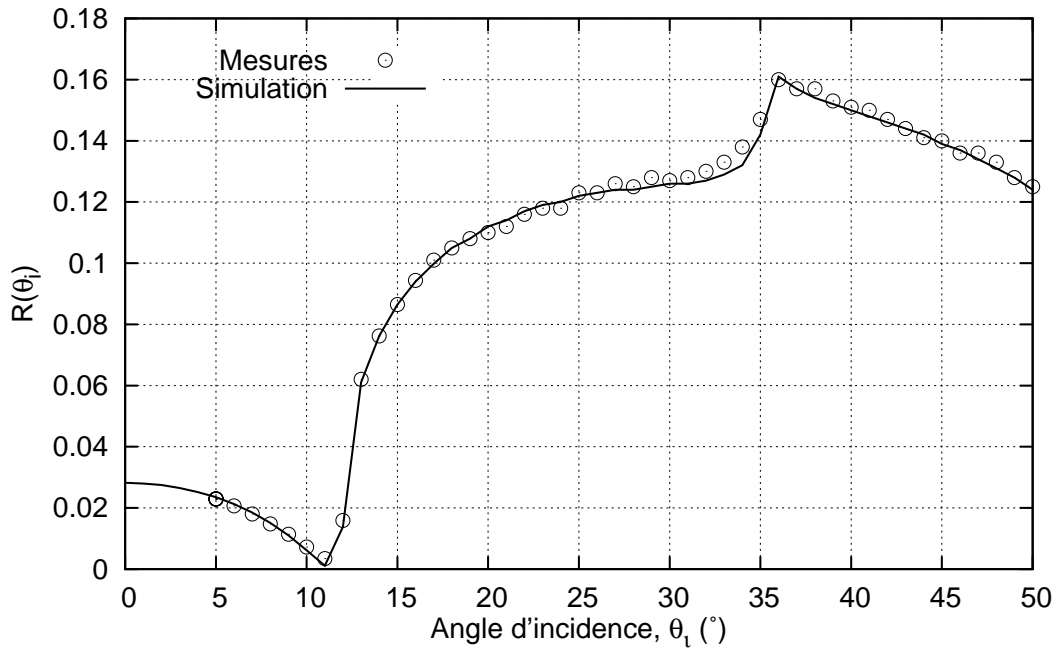
## 2.2 Reconstruction à partir de mesures en fonction de l'angle d'incidence

Contrairement au cas d'une structure non périodique pour laquelle la lumière est diffractée dans tout l'espace de façon continue, la lumière est localisée dans un nombre limité d'ordres de diffraction dans le cas d'une structure périodique. Une mesure en fonction de l'angle de diffraction (ou diffusion)  $\theta$  ne donne donc accès qu'à une information limitée.

Il est ainsi nécessaire de faire varier un des paramètres du champ incident pour obtenir suffisamment d'information pour la reconstruction. On peut par exemple faire varier l'angle d'incidence ou la longueur d'onde.

Les figures 3.3 et 3.4 présentent l'intensité et le déphasage polarimétrique, mesurés en fonction de l'angle d'incidence, dans le cas d'un réseau de résine déposé sur une plaque (*wafer*) de silicium. Le réseau étudié a été conçu pour être de forme lamellaire, pour avoir un pas de 800 nm et pour que le motif ait une hauteur de 220 nm et une largeur (CD) de 300 nm. Le réseau a une longueur totale d'environ 5 mm et une largeur d'environ 2 mm.



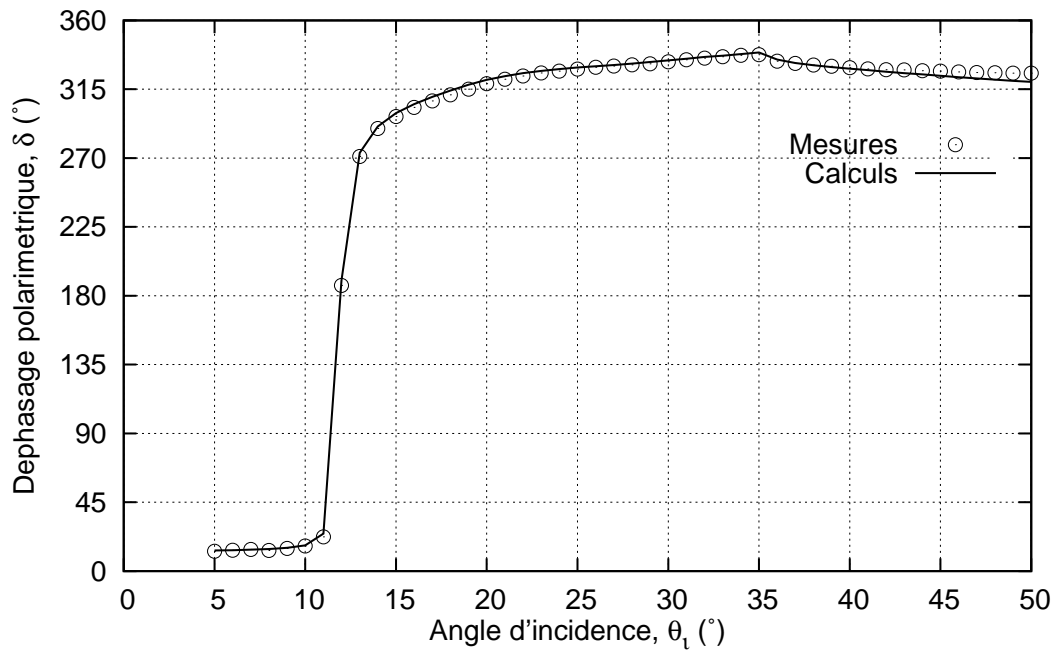


**Figure 3.3** Efficacité de l'ordre 0 diffracté par un réseau lamellaire de résine déposée sur un substrat de silicium (Fig. 3.5), en fonction de l'angle d'incidence  $\theta_i$ . Les mesures sont représentées par les cercles, la simulation correspondant au meilleur ajustement est représentée en trait continu. Les paramètres du meilleur ajustement sont :  $CD = 267$  nm et  $h = 227$  nm. La période est de 800 nm, la longueur d'onde de 632,8 nm, la polarisation TE. Les indices de réfraction utilisés pour le calcul ont été obtenus à partir des tables d'indice des matériaux et sont 1,5826 pour la résine et  $3,8815 + i0,01927$  pour le silicium. L'échantillon a été conçu par gravure à l'aide d'un faisceau d'électrons (*E-Beam*) par ST Microelectronics Crolles.

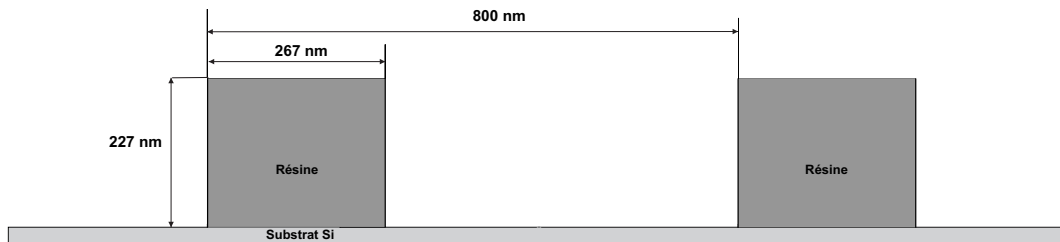
Le diffusomètre ellipsométrique présenté au chapitre précédent permet la réalisation de mesures en fonction de l'angle d'incidence. Ces mesures sont assez délicates car le faisceau doit rester positionné au centre de la structure, au cours de sa rotation<sup>10</sup>, ce qui demande un alignement précis de l'échantillon et du faisceau sur l'axe de rotation. De plus, au fur et à mesure de l'inclinaison, le spot prend une forme de plus en plus elliptique, et à partir d'un certain angle, il déborde de la structure. Pour ces deux raisons nous nous limitons à la plage angulaire située entre 0 et 50° afin d'avoir des données fiables pour la reconstruction.

Pour la reconstruction, nous avons considéré un réseau lamellaire et fait un ajustement sur deux paramètres, la hauteur du motif  $h$  et sa largeur  $CD$ . Cette

<sup>10</sup>La variation de l'angle d'incidence est obtenue par rotation de l'échantillon sur lui-même, le faisceau incident restant fixe. Le programme de pilotage ajuste la position du bras de mesure au fur et à mesure de la rotation, pour suivre l'ordre 0, ou un autre ordre de diffraction.



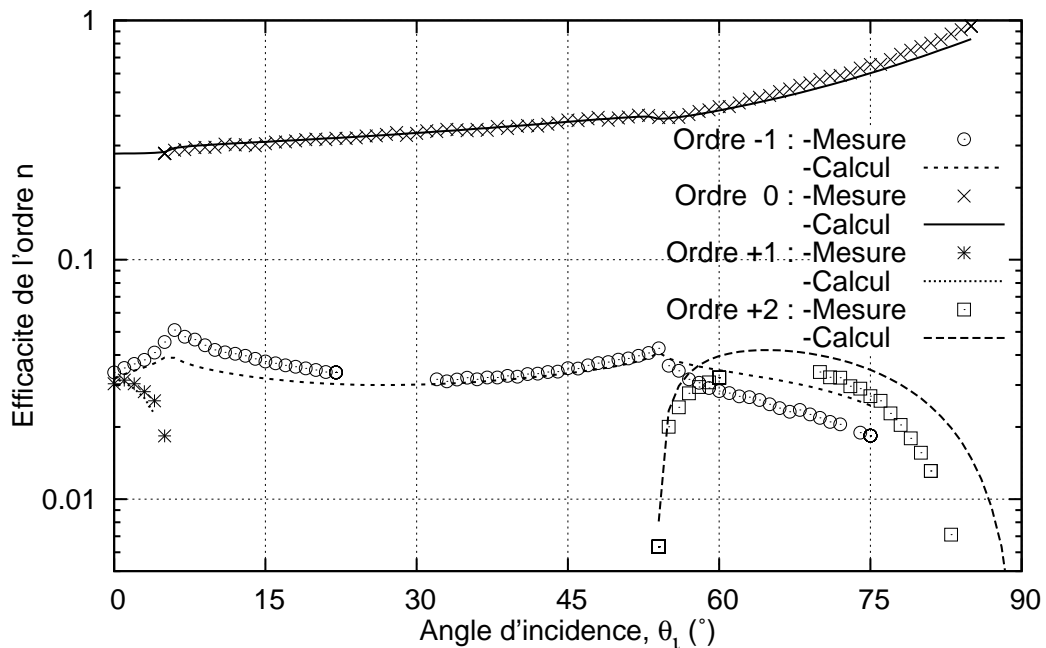
**Figure 3.4** Même chose que Fig. 3.3, pour le déphasage polarimétrique.



**Figure 3.5** Profil du réseau obtenu par reconstruction à partir des données représentées figures 3.3 et 3.4.

modélisation permet de très bien rendre compte des résultats expérimentaux (Figs. 3.3 et 3.4). Le meilleur ajustement est obtenu pour une hauteur de 227 nm et une largeur de motif de 267 nm.

Il est également possible d'utiliser l'information présente dans les autres ordres de diffraction pour la reconstruction. La figure 3.6 présente des mesures d'intensité pour les ordres  $-1$  à  $+2$  en fonction de l'angle d'incidence, pour un réseau conçu pour avoir une période de 700 nm, une largeur de motif de 50 nm et les mêmes paramètres que le réseau précédent par ailleurs. L'intensité calculée pour un réseau présentant ces paramètres est également présentée figure 3.6. On constate un bon agrément qualitatif entre mesures et calculs. Quantitativement l'accord n'est pas aussi bon que dans le cas précédent car d'une



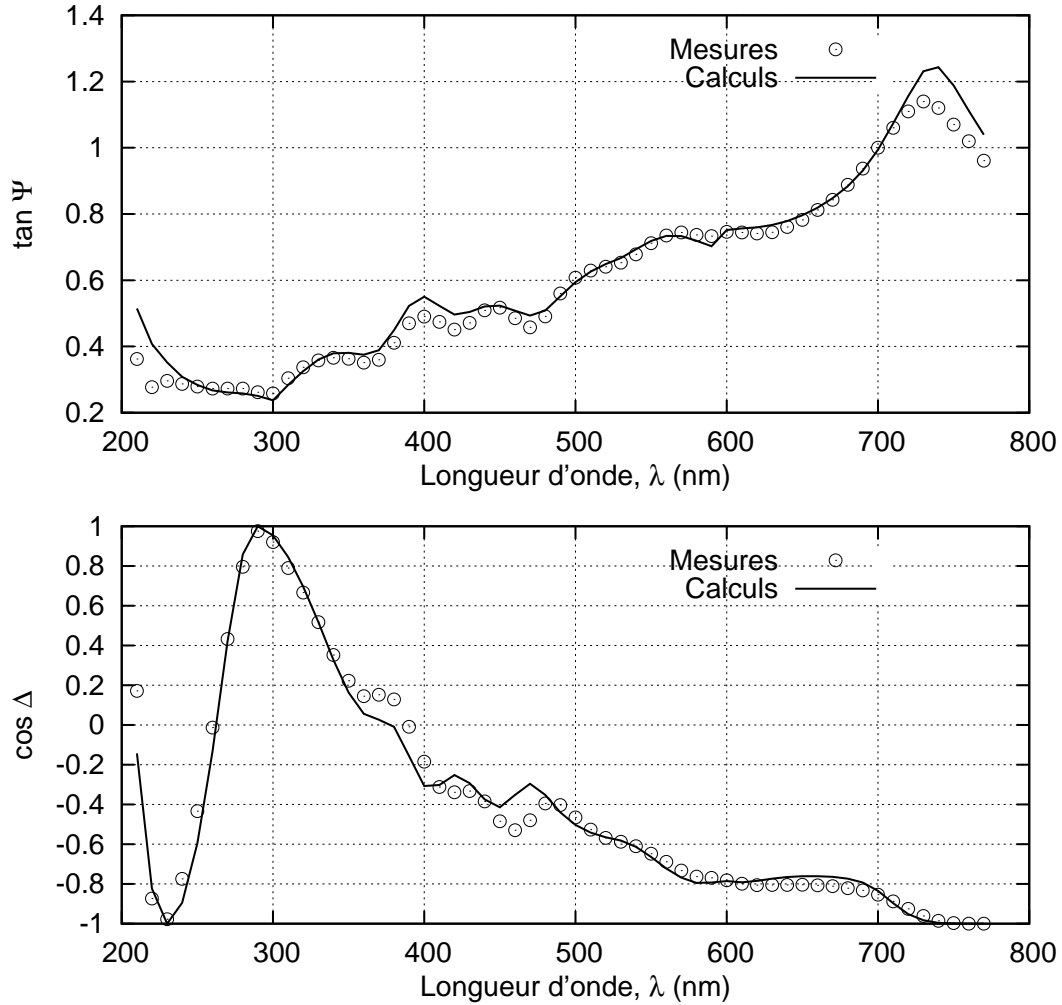
**Figure 3.6** Efficacités diffractées en fonction de l'angle d'incidence, pour plusieurs ordres de diffraction d'un réseau lamellaire de résine déposées sur silicium. Les paramètres de fabrication du réseau sont : période de 700 nm, CD de 50 nm, hauteur de 220 nm. Les autres paramètres du réseau et les conditions d'éclairement sont identiques à ceux de la figure 3.3 par ailleurs. Les mesures sont représentées accompagnées des calculs obtenus par la méthode différentielle (sans optimisation des paramètres du réseau).

part, pour représenter l'ensemble des ordres de diffraction, les mesures sont effectuées dans une large gamme angulaire, y compris là où l'alignement n'est pas parfait et d'autre part aucun ajustement n'a été réalisé sur les paramètres et on sait que la signature optique varie rapidement, même pour un écart de quelques nanomètres.

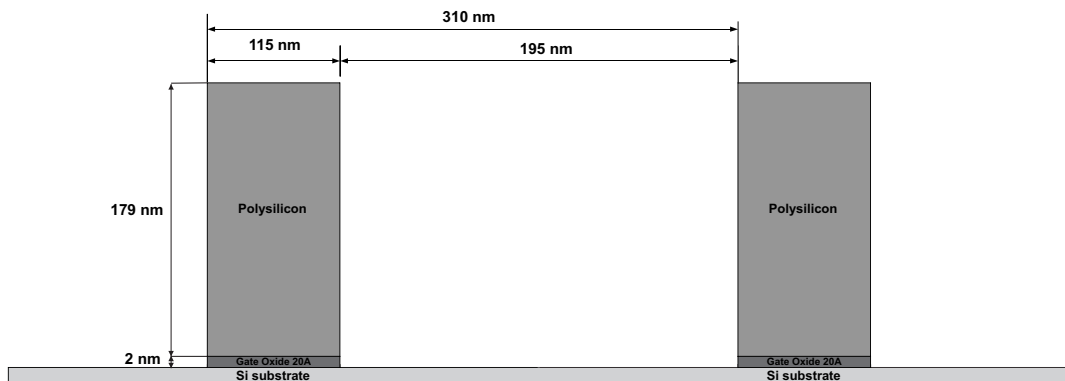
### 2.3 Reconstruction à partir de mesures en fonction de la longueur d'onde

La figure 3.7 présente les mesures de  $\tan \psi$  et  $\cos \Delta$ , dans le cas d'un réseau lamellaire dont le motif est constitué de l'empilement d'une fine couche d'oxyde de silicium et d'une couche de polysilicium, le tout sur un substrat de silicium cristallin. Ces mesures ont été effectuées par un ellipsomètre spectroscopique sur la structure de test d'une plaque en cours de fabrication à l'usine de ST Microelectronics Rousset.

Pour la modélisation, nous avons considéré une structure strictement la-



**Figure 3.7** Mesures ellipsométriques ( $\tan \psi$  et  $\cos \Delta$ ) de l'ordre 0 diffracté par une des structures de test d'une plaque de circuits en cours de fabrication (niveau *gate*). Mesures réalisées par un ellipsomètre spectroscopique en ligne de fabrication à ST Microélectronics Rousset. La structure de test est un réseau (représenté Fig. 3.8) approximativement lamellaire, dont le motif est constitué d'une couche de 2 nm d'oxyde de silicium, surmontée d'une couche de polysilicium, le tout sur un substrat de silicium cristallin. Les calculs effectués pour une structure lamellaire, dont les valeurs de la hauteur  $h_{poly}$  du polysilicium et de la largeur  $CD$  du motif minimisent l'écart quadratique moyen, sont également représentés. Les paramètres optimaux sont  $CD = 115$  nm et  $h_{poly} = 179$  nm.



**Figure 3.8** Profil du réseau obtenu après ajustement de la hauteur de polysilicium et de la largeur de la ligne à partir des données représentées Fig. 3.7.

mellaire (pente des parois verticale) et fait un ajustement sur deux paramètres : la largeur du motif ( $CD$ ) et la hauteur de la couche de polysilicium ( $h_{Poly}$ ). L'épaisseur de la couche d'oxyde de silicium a été considérée connue et fixée à 20 nm, d'après les données de fabrication.

Les paramètres donnant le meilleur ajustement sont un  $CD$  de 115 nm et une hauteur de polysilicium de 179 nm. Le profil reconstruit est représenté 3.8.

L'ajustement entre données mesurées et simulation n'est pas parfait, ce qui signifie que la modélisation n'est pas tout à fait adaptée. En fait lorsque l'on réalise une image par XSEM, après clivage de la plaque, de ce type de structures, on constate souvent une pente légèrement différente de la verticale et un léger arrondi des angles. La reconstruction d'une telle structure, plus complexe, est discutée dans le paragraphe suivant.

### 3 Cas des structures complexes

#### 3.1 Structures non lamellaires

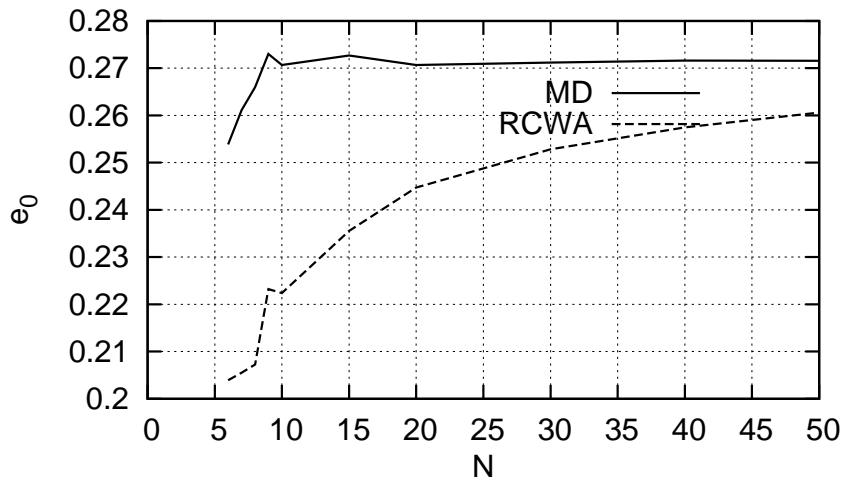
Les méthodes utilisées pour les applications de *scatterometry* sont généralement du type RCWA. Ces méthodes sont par nature adaptées aux structures lamellaires ou en forme de marches d'escalier. Quand elles sont appliquées à des structures de forme différente, nous avons vu (cf. première partie, chapitre 2) que la convergence vis à vis du nombre d'harmoniques était lente, surtout si le matériau est métallique.

Dans le cas d'une structure dont la forme et les matériaux correspondent à ceux rencontrés en microélectronique nous souhaitons voir si ce problème de convergence se pose également.

La figure 3.10 présente la convergence de l'efficacité de l'ordre 0, d'un ré-



**Figure 3.9** Profil d'un réseau de silicium avec parois non verticales et angles arrondis. La période est de 310 nm, la hauteur de 200 nm, l'indice de réfraction du silicium pour la longueur d'onde de 285 nm est pris à  $3,5 + i5,5$ , l'incidence est normale et la polarisation TM.



**Figure 3.10** Convergences, en fonction du paramètre de troncation  $N$ , de l'efficacité de l'ordre 0 diffracté par le réseau décrit Fig. 3.9, pour la méthode différentielle et la méthode RCWA. Pour la méthode RCWA, le profil est approché par le profil équivalent avec 1000 marches d'escalier.

seau de silicium, avec des pentes non verticales et des angles arrondis (Fig. 3.9). Les résultats obtenus par la méthode différentielle (règles de factorisation correctes dans le cas d'une structure de forme arbitraire) et par la méthode RCWA (règles de factorisation correctes dans le cas d'une structure lamellaire ou en forme de marches d'escalier) sont comparés.

Une erreur inférieure à 5% est obtenue à partir de  $N = 50$  pour la méthode RCWA. La convergence est beaucoup plus rapide avec la méthode différentielle puisque une erreur inférieure à 5% est obtenue à partir de  $N = 7$ .

Notons cependant que les résultats présentés figure 3.10 utilisent un découpage avec mille tranches pour la méthode RCWA. Un découpage avec un nombre de tranches inférieur, tout en convergeant vers une valeur moins pré-

cise, convergerait plus rapidement et constituerait ainsi un meilleur compromis (tout en restant moins performant que la méthode différentielle).

Ces résultats montrent que la méthode RCWA n'est pas très bien adaptée pour la reconstruction de structures non lamellaires. Même si les résultats convergent vers la bonne valeur, les contraintes sur le temps de calcul (proportionnel à  $N^3$ ) ne permettent pas de prendre une valeur élevée de  $N$  et impliquent de se contenter d'une précision limitée. Cette précision limitée pourrait expliquer l'existence d'un écart absolu souvent observé entre les valeurs obtenues par *scatterometry* et par CD-SEM.

En revanche, grâce au respect des règles de factorisation dans le cas d'une structure de forme quelconque, la méthode différentielle converge beaucoup plus rapidement que la méthode RCWA. De plus, avec l'algorithme d'intégration matriciel présenté au chapitre 2 de la première partie, elle devient également plus rapide à nombre de pas d'intégration égal.

La méthode différentielle semble donc bien adaptée pour la reconstruction de structures de formes non lamellaires.

### 3.2 Structures tridimensionnelles : métrologie des trous de contacts

Une couche de contacts permet d'assurer les connections entre les transistors et la circuiterie qui les relie entre eux. La réalisation des contacts se fait par la création de trous cylindriques (Fig. 3.11) dans un matériau isolant, puis par le remplissage de ces trous par un matériau conducteur.

La mesure du diamètre et de la profondeur des trous permet de s'assurer que le contact électrique sera assuré correctement.

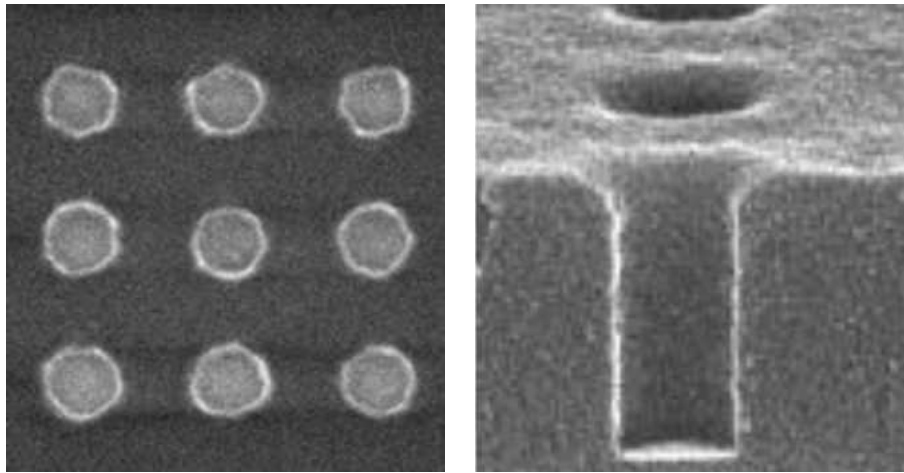
Plusieurs études [80, 81, 82] montrent la capacité de la *scatterometry* à mesurer le diamètre et la profondeur des trous, avec une bonne répétabilité et de façon corrélée avec les mesures obtenues au CD-SEM<sup>11</sup>. Par contre les valeurs absolues peuvent différer de 10 à 15% avec les mesures du CD-SEM. Les mesures par *scatterometry* des trous de contact se heurtent cependant à plusieurs difficultés. Par exemple, d'après Quintanilha et al. [83], des trous de contact de forme carrée ne peuvent être distingués de trous circulaires.

La structure de test utilisée pour ces mesures est constituée d'un réseau bi-périodique de trous. La diffraction par cette structure est modélisée par un code de diffraction tridimensionnel. L'algorithme utilisé par les équipements pour le calcul de la diffraction est généralement basé sur l'algorithme proposé par L. Li [5]. Cet algorithme est adapté pour des trous dont les parois sont parallèles aux directions d'invariance (par exemple des trous carrés).

En trois dimensions, il est très important que les règles de factorisation soient bien adaptées à la structure étudiée car, dans le cas contraire, on ne peut

---

<sup>11</sup> Ce dernier permet la mesure du diamètre uniquement, pas de la profondeur.



**Figure 3.11** Images par microscopie électronique à balayage d'une structure de test pour la mesure des trous de contact en vue de dessus (CD-SEM) et vue de coupe (XSEM).

compenser la lente convergence par une augmentation du nombre d'harmoniques sans une lourde pénalité au niveau de la durée du calcul <sup>12</sup>.

L'utilisation du code présenté au chapitre 4 de la première partie, respectant les règles de factorisation dans le cas de parois de forme arbitraire, devrait donc permettre une amélioration de la vitesse et de la précision de la reconstruction des trous de contacts par rapport au cas où l'algorithme de L. Li est utilisé.

## 4 Bilan

Il serait intéressant de développer de façon plus approfondie les exemples de reconstruction présentés dans ce chapitre, en particulier, d'améliorer la modélisation de la structure pour augmenter l'adéquation entre mesures et calculs, puis de comparer les résultats de la reconstruction avec des mesures de nature différente (AFM, microscopie électronique).

Hormis la mesure de la lumière diffractée, la partie la plus difficile dans le processus de reconstruction concerne le calcul direct de la diffraction. Nous avons intégré, dans la première partie de ce manuscrit, plusieurs améliorations au code de calcul, qui sont de nature à améliorer la précision et la rapidité de la reconstruction.

En particulier, pour des structures non lamellaires et pour les structures tridimensionnelles, les codes présentés dans la première partie sont beaucoup

<sup>12</sup>La durée du calcul étant proportionnelle à  $N^6$ , si  $N$  désigne le paramètre de troncation selon  $x$  et selon  $y$ .



mieux adaptés que ceux habituellement utilisés pour la reconstruction en microélectronique.

La durée du calcul direct est un point auquel il faut prêter attention car il se répercute de façon démultipliée dans la durée du calcul de reconstruction. L'algorithme d'intégration matriciel présenté au chapitre 2 de la première partie améliore considérablement la vitesse de calcul de la méthode différentielle, de façon à la rendre compatible avec les contraintes de production industrielle. Nous pensons que ce nouvel algorithme devrait permettre des avancées notables pour la métrologie des structures non lamellaires en microélectronique.

## Chapitre 4

# Diffusion de la lumière par des réseaux rugueux

En microélectronique, les structures de test utilisées pour les mesures optiques de dimensions critiques sont des réseaux qui présentent naturellement une certaine rugosité. Cette rugosité est intéressante à caractériser car il a été montré qu'elle est corrélée à certaines propriétés électriques du circuit, et qu'au delà d'une certaine valeur elle altère son fonctionnement.

Outre l'intérêt pour le domaine de la microélectronique, l'étude de l'influence de la rugosité est également importante pour les applications aux réseaux de diffraction. Ces derniers voient leur pertes par diffusion, et éventuellement par absorption, augmenter avec la rugosité.

Les réseaux ne sont pas les seules structures périodiques pour lesquelles l'influence des défauts est un problème important à étudier, c'est le cas également des cristaux photoniques, structures périodiques selon trois dimensions.

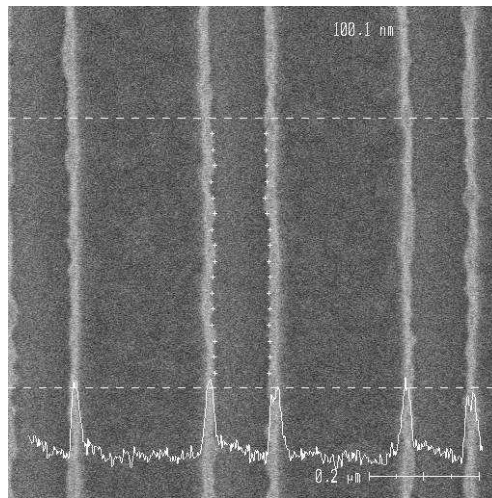
D'un point de vue fondamental, l'influence de la rugosité sur la diffraction par une structure périodique est un problème qui a été peu étudié. En particulier, à notre connaissance, il n'existe à ce jour aucun outil de calcul spécifique pour l'étude de ce problème.

## 1 Rugosité des lignes en microélectronique

L'image, obtenue par microscopie électronique, d'un réseau de lignes sur une plaque en cours de fabrication, est représentée 4.1. On constate la présence d'oscillations le long des bords de lignes. L'origine de ces irrégularités peut être un phénomène d'interférences parasites lors de la photolithogravure, ou bien le fait que la résine présente une certaine taille de grains.

La métrologie de la microélectronique distingue habituellement trois types de rugosités :

- La rugosité du bord de ligne (en vue aérienne), *Line Edge Roughness* (LER)



**Figure 4.1** Image CD-SEM, d'un réseau de lignes sur une plaque en cours de fabrication, mettant en évidence la présence de rugosité de bord de ligne (LER). (Les zones claires correspondent aux parois des lignes ; les lignes sont les zones les plus étroites entre deux parois).

- La rugosité de la largeur de la ligne, *Line Width Roughness* (LWR) <sup>1</sup>
- La rugosité de la paroi, *Side Wall Roughness* (SWR)

Il a été montré récemment que la rugosité du bord de ligne était corrélée avec une augmentation du courant de fuite des transistors [7, 8].

La mesure de la rugosité de ligne fait partie des recommandations de l'ITRS, depuis 2001. Cependant cette mesure est difficile et actuellement, seul le CD-SEM peut être utilisé en production pour la réaliser.

Une mesure optique de cette rugosité présenterait les mêmes avantages que pour la mesure optique de la partie périodique, présentée au chapitre 3 : rapidité, non destructivité, répétabilité élevée et probablement une information plus complète.

<sup>1</sup>la LWR et la LER ne sont pas des grandeurs indépendantes ; si les rugosités de chacun des deux bords de ligne sont non corrélées et de même amplitude, on a  $LWR = \sqrt{2}LER$  (cf. [77]).

## 2 Calcul et mesure de la diffusion par un réseau rugueux

### 2.1 Calcul de la diffraction et de la diffusion par un réseau rugueux

L'étude de la rugosité de ligne demande une modélisation tridimensionnelle de la structure et l'emploi d'une modélisation spécifique est souhaitable pour faire face à la complexité du problème en un temps raisonnable.

Nous nous maintenons dans ce chapitre à une étude bidimensionnelle, plus facile à mettre en œuvre avec les outils dont nous disposons, afin de dégager les premiers éléments intéressants.

Nous considérons une rugosité sur la *hauteur* de l'interface, c'est à dire une structure rugueuse dont les coordonnées de l'interface peuvent être décrites par une fonction  $h(x)$ , telle que  $h(x) = p(x) + r(x)$ , où  $p(x)$  est une fonction périodique et  $r(x)$  une fonction représentant la rugosité (avec typiquement  $r(x) < p(x)$ ).

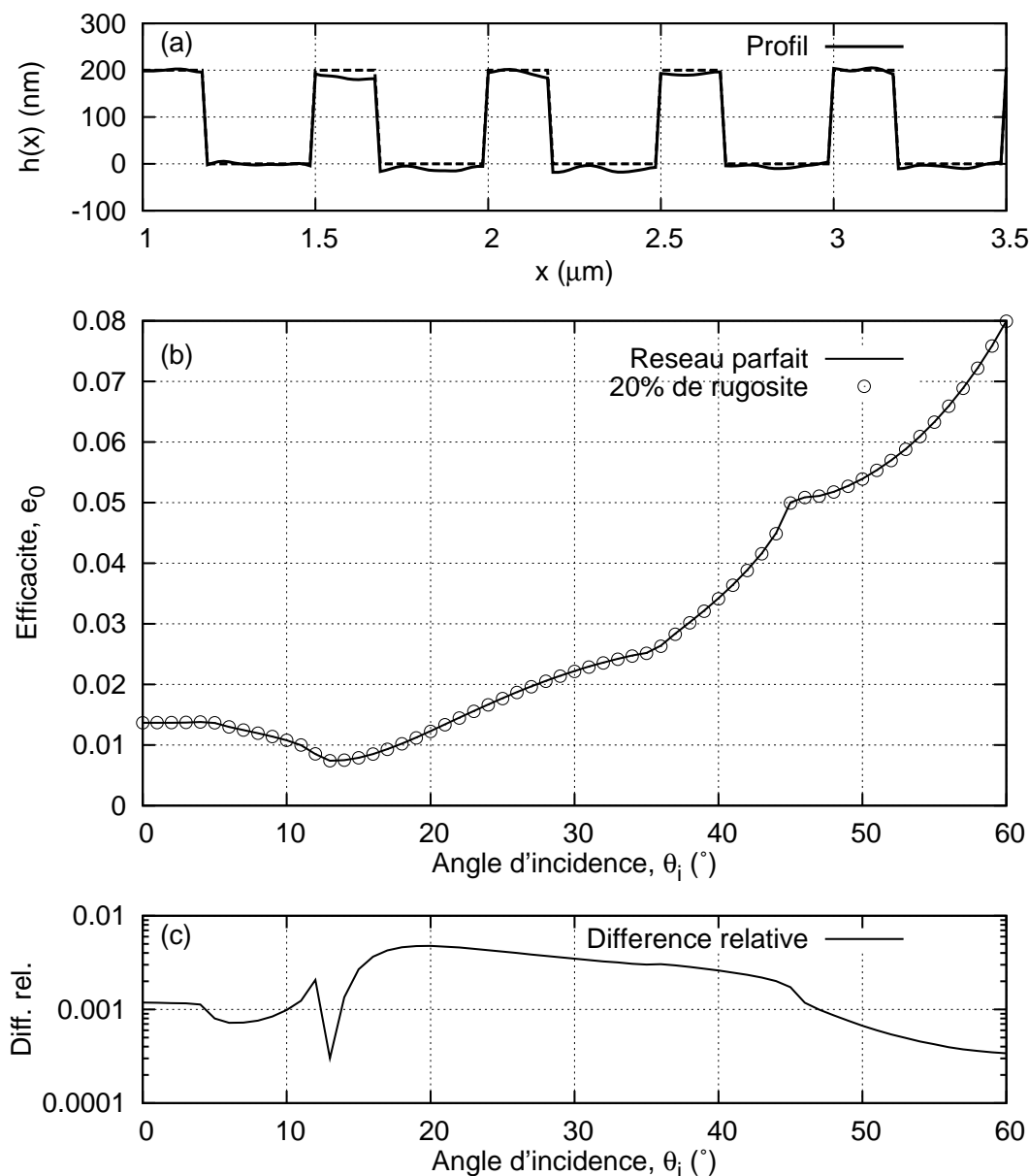
Les méthodes de reconstruction utilisées en métrologie de la microélectronique, s'appuient sur des mesures ellipsométriques ou d'intensité, effectuées sur l'ordre 0 en fonction de la longueur d'onde. Des mesures en fonction de l'angle d'incidence et pour une seule longueur d'onde peuvent aussi être utilisées pour la reconstruction (cf. chap. 3).

La figure 4.2 présente le calcul de l'efficacité de l'ordre 0, en fonction de l'angle d'incidence, dans le cas d'un réseau lamellaire rugueux et dans le cas du même réseau en l'absence de rugosité. Les réseaux sont diélectriques et éclairés en polarisation TE. Bien que l'amplitude de la rugosité soit de 20% de l'amplitude de modulation du réseau, la différence entre les deux courbes n'est pas visible et n'excède pas 0,5 % en valeur relative. La rugosité a donc une influence quasi négligeable sur l'ordre 0, dans le cas de ce réseau, en polarisation TE.

Ces résultats vont dans le même sens que ceux de Poladian et al. [84] qui ont montré une faible influence de la rugosité sur les ordres transmis par un réseau de Bragg diélectrique.

Par contre Saillard et al. [85] ont montré, théoriquement et expérimentalement, que dans le cas d'un réseau métallique éclairé en polarisation TM, la rugosité entraînait une augmentation importante de l'absorption et ont suspecté un rôle des plasmons dans cette absorption accrue.

Ces résultats montrent que le lien entre la rugosité et l'intensité dans les ordres de diffraction n'est pas simple. Dans le cas d'un réseau diélectrique, les ordres semblent peu affectés par la rugosité. Dans le cas des réseaux métalliques, la rugosité peut entraîner une modification de l'intensité pour un ordre,



**Figure 4.2** Calcul de l'efficacité de l'ordre 0 réfléchi par un réseau parfait et un réseau rugueux, en fonction de l'angle d'incidence. Les réseaux ont un indice de réfraction de 1,5, une période de 1  $\mu\text{m}$ , une amplitude de 200 nm, le champ incident a une longueur d'onde de 632,8 nm et une polarisation TE. La rugosité a une amplitude de 20% de l'amplitude du réseau, soit une rugosité quadratique de 16 nm. (a) Profils des réseaux, (b) Efficacités, (c) Différence relative des efficacités du réseau rugueux et du réseau parfait (échelle log.).



**Figure 4.3** Profil du réseau lamellaire rugueux correspondant aux calculs de diffusion de la figure 4.4.

qui peut être une diminution ou une augmentation selon l'ordre de diffraction considéré et selon les paramètres géométriques du réseau.

Les mesures de scatterometrie, qui s'appuient uniquement sur l'ordre 0 de diffraction, sont donc inadaptées pour caractériser la rugosité et un autre type de mesures doit être envisagé.

Le calcul de l'intensité diffusée par trois réseaux de différentes rugosités, en fonction de l'angle de diffusion, est représenté figure 4.4.

Les réseaux sont diélectriques, de forme lamellaire, sont éclairés en polarisation TE et ont une rugosité dont l'amplitude vaut 2%, 5% ou 10% de l'amplitude de la modulation périodique (cf. Fig. 4.3).

Dans le cas d'un réseau parfait les simulations donnent une valeur strictement nulle de l'intensité entre les ordres de diffraction. Dans le cas d'un réseau présentant de la rugosité, la figure 4.4 montre la présence de lumière diffusée entre les ordres et montre que l'intensité de cette lumière varie de façon croissante avec la rugosité.

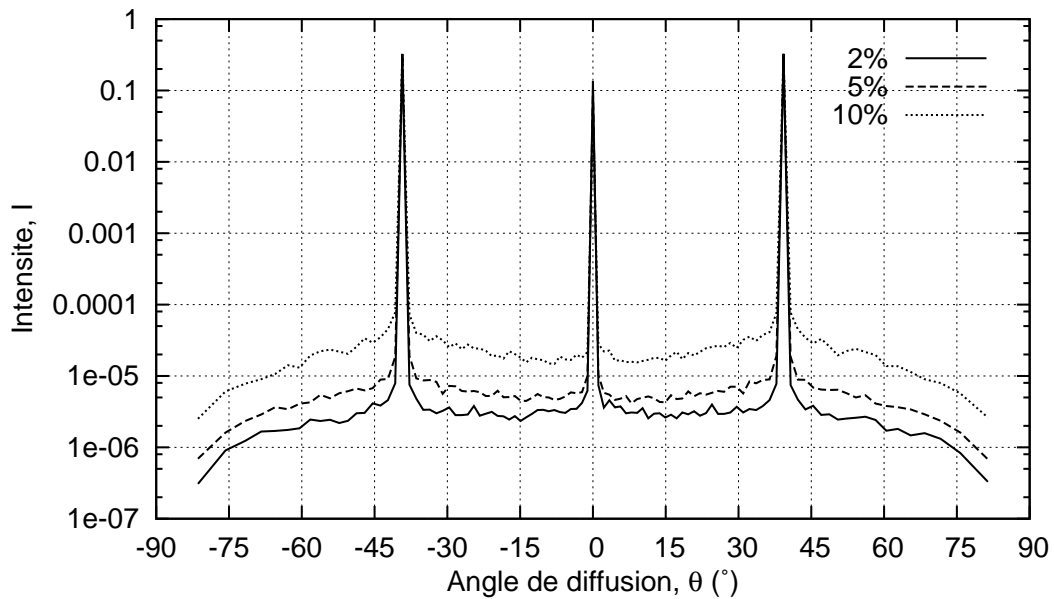
Contrairement à une mesure de la lumière dans les ordres de diffraction en fonction de l'angle d'incidence ou en fonction de la longueur d'onde, une mesure en fonction de l'angle de diffusion apporte donc de l'information sur la rugosité qu'il est possible d'exploiter.

En particulier, il est possible de caractériser l'amplitude de la rugosité, à partir du niveau moyen d'intensité entre les ordres. De plus, dans le cas où la rugosité est petite devant la longueur d'onde, l'intensité diffusée entre les ordres devrait donner accès au spectre de rugosité, c'est à dire à sa décomposition en harmoniques (cf. paragraphe 3).

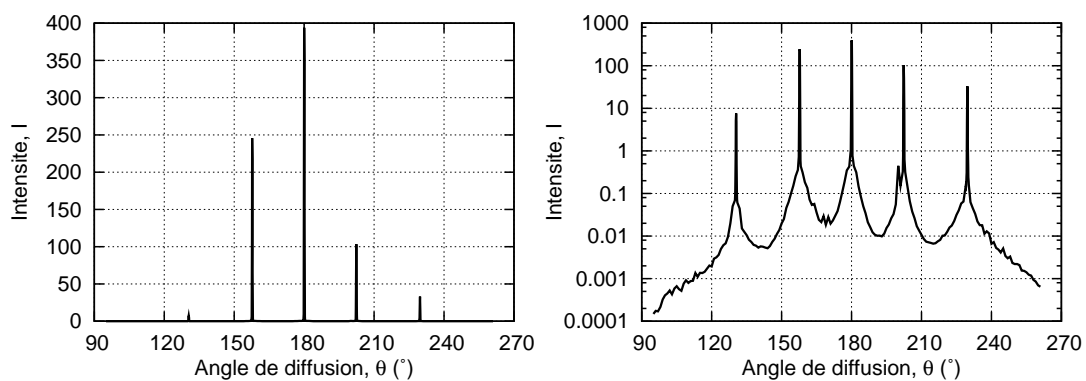
## 2.2 Mesure de la lumière diffusée par un réseau rugueux

La mesure de l'intensité diffusée en transmission par un réseau de verre est représentée figure 4.5. Le profil du réseau correspondant est représenté Fig. 4.6. Le réseau est éclairée par un laser He-Ne ( $\lambda = 632,8$  nm), en incidence normale et en polarisation TE.

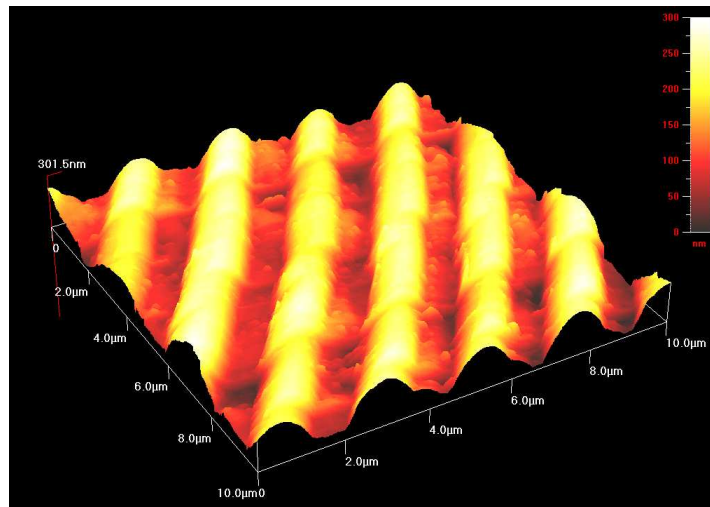
On observe des pics d'intensités, très localisés, qui constituent les ordres de diffraction. Entre les ordres, on observe une faible intensité qui diminue progressivement quand on s'éloigne d'un ordre.



**Figure 4.4** Calculs de la diffusion, en polarisation TE, par des réseaux diélectriques lamellaires rugueux (cf. Fig. 4.3) pour différentes amplitudes de rugosité. Les réseaux ont une période de  $1\ \mu\text{m}$ , une largeur de ligne de  $0,5\ \mu\text{m}$  et une amplitude de  $200\ \text{nm}$ . Les amplitudes des rugosités sont de 2%, 5% et 10% de l'amplitude du réseau, ce qui correspond à des rugosités quadratiques de  $1,6\ \text{nm}$ ,  $4\ \text{nm}$  et  $8\ \text{nm}$ , respectivement. L'indice de réfraction est de 1,5, la longueur d'onde de  $632,8\ \text{nm}$ , l'incidence est normale, les calculs sont effectués sur une longueur d'échantillon de  $16\ \mu\text{m}$  et chaque courbe représente une moyenne sur 100 calculs pour lisser le speckle.



**Figure 4.5** Mesure de l'intensité diffusée en transmission par un réseau en verre. Echelle linéaire à gauche et logarithmique à droite. Entre les pics d'intensité, correspondant aux ordres de diffraction, on observe une faible intensité correspondant à la lumière diffusée par les défauts non périodiques. Réseau de période  $1,66\ \mu\text{m}$ , éclairé en incidence normale, par un laser He-Ne ( $\lambda = 632,8\ \text{nm}$ ), en polarisation TE.



**Figure 4.6** Image AFM de la surface du réseau de verre dont la diffusion est mesurée Fig. 4.5. En plus de la modulation périodique, on observe une rugosité sur la hauteur de l'interface et un léger décalage non périodique de la position des lignes.

La lumière apparaissant entre les ordres pourrait être attribuée à la divergence du faisceau laser que l'on retrouve approximativement autour de chaque ordre. Cependant les conditions expérimentales sont telles, que cette divergence ( $\sim 0,05^\circ$ ) est suffisamment faible pour entraîner une diminution de l'intensité beaucoup plus rapide que ce qui est observé.

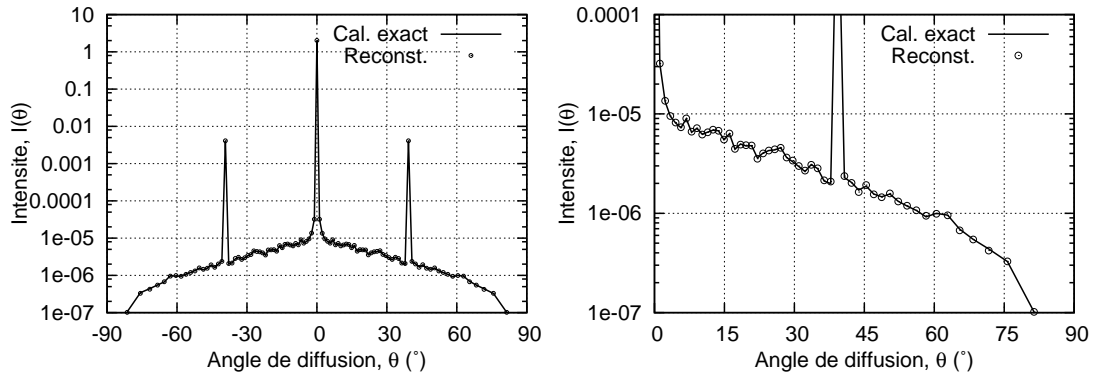
La figure 4.6 montre une image AFM de la surface du réseau. On observe d'une part une rugosité de type bord de ligne (LER), ainsi qu'une rugosité sur la hauteur de l'interface.

### 3 Modélisation adaptée

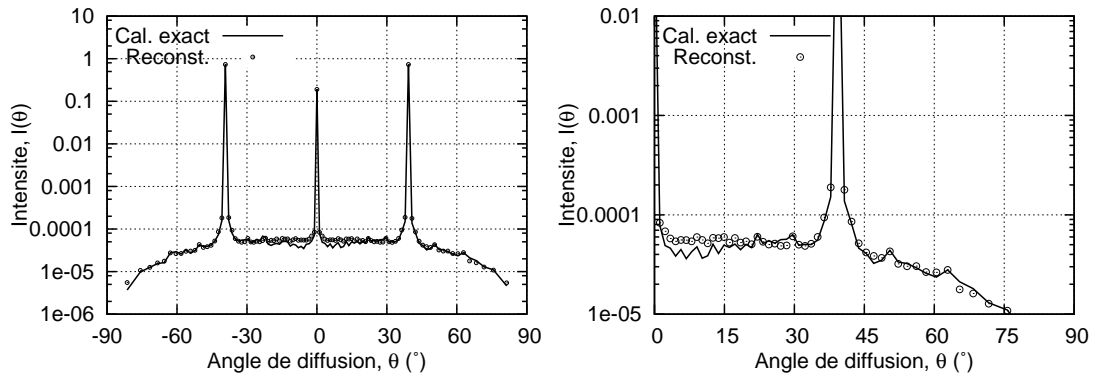
Nous venons de voir que l'utilisation de la méthode différentielle permet de traiter le problème d'un réseau rugueux invariant selon une dimension. D'autres méthodes rigoureuses, la méthode intégrale par exemple, peuvent également être utilisées pour ce problème du réseau rugueux. Cependant, afin de prendre en compte les fréquences spatiales du champ diffusé, la modélisation demande l'utilisation d'un nombre d'harmoniques beaucoup plus grand que dans le cas d'un réseau parfait. Ceci a pour effet de conduire à des temps de calcul élevés (plusieurs heures pour une courbe de diffusion moyennée), qui n'est pas compatible avec une utilisation en métrologie.

D'un autre côté des méthodes approximatives existent et permettent de traiter le problème de la diffusion par une surface rugueuse avec une durée de calcul quasi négligeable. Par exemple la méthode du premier ordre [65] permet de traiter parfaitement le cas des rugosités de l'ordre ou inférieures





**Figure 4.7** Calcul de la diffusion par un réseau diélectrique sinusoïdal, d'amplitude 10 nm avec une rugosité d'amplitude 5 nm, en polarisation TE. Calcul exact par la méthode différentielle et reconstitution obtenue par convolution du spectre de diffusion de la surface rugueuse seule par le spectre de diffraction du réseau parfait. A gauche : vue d'ensemble ; à droite : agrandissement. La longueur d'onde est de 632,8 nm, la période du réseau est de 1  $\mu\text{m}$ , l'incidence est normale, l'indice de réfraction vaut 1,5.



**Figure 4.8** Même chose que la figure 4.7 pour un réseau d'amplitude 200 nm avec une rugosité d'amplitude 20 nm.

à un dixième de la longueur d'onde, mais n'est pas adéquate pour traiter la modulation du réseau qui est de l'ordre de la longueur d'onde.

Une modélisation adaptée au cas des réseaux rugueux consisterait donc à utiliser une méthode rigoureuse pour la partie périodique de la structure, couplée à une méthode perturbative pour tenir compte de la rugosité.

Ce paragraphe constitue une première approche dans cette recherche d'une modélisation adaptée.

La figure 4.7 présente le calcul de la diffusion par un réseau diélectrique sinusoïdal  $p(x)$  d'amplitude 10 nm avec une rugosité  $r(x)$  d'amplitude 5 nm. À côté du calcul obtenu par la méthode différentielle pour le réseau rugueux

$h(x) = p(x) + r(x)$ , est présenté le calcul obtenu par la convolution, dans l'espace de fréquences spatiales  $\sigma$ , de la figure de diffusion par la surface rugueuse  $r(x)$  et du spectre discret de diffraction par la partie périodique  $p(x)$ . On constate que les deux calculs s'accordent très bien.

La figure 4.8 présente le même type de calculs mais pour un réseau de 200 nm d'amplitude avec une rugosité de 20 nm. L'amplitude de la rugosité reste dans le domaine des méthodes perturbatives mais pas la modulation périodique. On constate un assez bon accord entre le calcul complet et la courbe obtenue par convolution.

Cette façon de décomposer le calcul permet un gain considérable en vitesse, puisque le calcul de la diffusion par la surface rugueuse peut être fait par la méthode perturbative, et que celui d'une structure strictement périodique ne demande que l'utilisation d'un nombre restreint d'harmoniques avec la méthode rigoureuse, donc une durée de calcul considérablement réduite<sup>2</sup>. De plus, si on utilise la théorie du premier ordre pour le calcul de la diffusion, on peut accéder directement au spectre de rugosité de la surface à partir de la mesure de l'intensité diffusée. Ceci reste cependant une première approche empirique, et demande une investigation théorique plus rigoureuse.

## 4 Bilan et perspectives

Nous venons de voir que la diffusion par les réseaux rugueux pouvait être déterminée à l'aide de la méthode différentielle. Les calculs montrent qu'une mesure de l'intensité de la lumière diffusée en fonction de l'angle de diffusion semble adaptée à une caractérisation de la rugosité, contrairement aux mesures qui s'appuient sur la mesure d'un des ordres de diffraction en fonction de la longueur d'onde ou de l'angle d'incidence.

Les calculs présentés s'appuient sur une hypothèse d'invariance de la rugosité selon une dimension qui n'est pas réaliste dans la majorité des cas. Il serait très intéressant d'utiliser le code tridimensionnel présenté au chapitre 4 de la première partie pour vérifier si cette hypothèse a une influence importante sur les résultats. Le banc de diffusion permettant la mesure dans les trois dimensions, ces calculs pourront ensuite être comparés aux mesures.

L'étude de la diffusion par les défauts non périodiques dans des structures périodiques demeure peu étudié ; l'utilisation d'une méthode rigoureuse permet de traiter le problème mais est confrontée à une lourdeur numérique difficile à surmonter dans le cas tridimensionnel. La mise en œuvre d'une méthode "semi-rigoureuse" adaptée à ce problème est donc un axe qu'il est souhaitable de développer.

---

<sup>2</sup>On rappelle que, pour la méthode différentielle, si le nombre d'harmoniques est divisé par 10, la durée du calcul est divisée par  $10^3 = 1000$ .



# Conclusion et perspectives

Nous avons mis en place une méthode rigoureuse de calcul de la diffraction et de la diffusion, la méthode différentielle, pour différents cas de structures et conditions d'éclairement.

Le cas des structures invariantes selon une dimension avec un plan d'incidence perpendiculaire (cas classique) a d'abord été traité pour les polarisation TE (ou s) et TM (ou p). Les équations ont été écrites sans faire d'hypothèse sur la périodicité ; le cas périodique correspondant à un choix particulier de discrétisation dans l'espace des fréquences spatiales.

L'algorithme des matrices S, permettant de traiter des structures d'épaisseur importante sans problème de perte de précision numérique a été implémenté, ainsi que la formulation respectant les règles de factorisation rapides des série de Fourier. Nous avons formulé un nouvel algorithme d'intégration matriciel qui permet de résoudre le système des équations du champ en réduisant considérablement le nombre d'opérations, ce qui permet d'obtenir une durée de calcul approximativement proportionnelle au cube du nombre d'harmoniques utilisées, au lieu du nombre d'harmoniques à la puissance quatre. Cette amélioration de la vitesse n'est pas seulement utile au confort d'utilisation de la méthode, elle permet surtout d'envisager un plus grand nombre d'applications.

Le cas des structures invariantes selon une dimension avec un plan d'incidence quelconque, puis le cas des structures tridimensionnelles de forme arbitraire ont ensuite été décrit et mis en œuvre. Le cas tridimensionnel pour des structures de formes arbitraires, n'avait à notre connaissance jamais été mis en œuvre jusqu'alors. Ceci s'explique, outre la complexité des équations par la difficulté numérique à traiter ce problème. L'algorithme d'intégration matriciel nous a permis de surmonter cette difficulté. Notons que par rapport aux autres méthodes exactes qui nous ont permis de valider nos résultats, la méthode différentielle présente l'avantage d'être capable de traiter des structures constituées d'un grand nombre de matériaux dans des configurations de forme arbitraire.

Nous avons ensuite appliqué cet outil de modélisation à la métrologie des composants microélectroniques en cours de fabrication ainsi qu'à la caractérisation et à l'imagerie des milieux complexes.

Pour les applications à la métrologie de la microélectronique, nos codes permettent d'obtenir une convergence beaucoup plus rapide des résultats dans le cas de structures de formes non lamellaires. Ceci s'applique aussi bien aux structures invariantes selon une dimension, qu'aux structures tridimensionnelles bipériodiques (trous de contacts). Cette meilleure convergence devrait permettre une reconstruction plus fiable, plus précise et tenant compte de plus de paramètres.

Ces structures périodiques utilisées pour la métrologie présentent également de la rugosité. Nous avons montré que les mesures spéculaires étaient inadaptées pour la caractérisation de cette rugosité. Nos calculs montrent par contre, qu'une mesure de la lumière diffusée, située entre les ordres de diffraction, permet d'obtenir une information directement liée à la rugosité de la structure.

Plusieurs résultats ont été obtenus concernant les propriétés de la lumière diffusée par des échantillons aux interfaces rugueuses ou inhomogène en volume. Parmi ces résultats : dans le cas de surfaces rugueuses, la présence d'oscillations du déphasage polarimétrique, qui avait déjà été mesurée, est confirmée par nos simulations. Nos calculs montrent que ces oscillations restent d'amplitude limitée tant que les pentes de la surface rugueuse sont modérées. Nos calculs confirment également que la présence d'un saut de  $0^\circ$  à  $180^\circ$  dans le déphasage, quand l'incidence est suffisante, est une signature fiable d'une d'origine surfacique de la diffusion. Dans le cas de la lumière diffusée par des membranes poreuses, nos simulations confirment que le déphasage oscille d'un grain de speckle à l'autre, avec une amplitude de variation croissante avec la taille des grains. Ce résultat confirme les mesures ; ce phénomène offre une méthode originale de caractérisation des membranes.

Concernant l'imagerie en milieu diffusant grâce à la technique d'annulation sélective de la lumière diffusée, nous montrons que même si les paramètres d'annulation varient généralement d'un grain de speckle à l'autre et dépendent de la microstructure dans le cas d'échantillons fortement diffusants, ces paramètres varient peu dans le cas de surfaces rugueuses de pentes modérées. Nous montrons que dans ce cas, les paramètres d'annulation, peuvent être obtenus de façon satisfaisante par des méthodes approchées, ce qui permet d'obtenir une annulation à l'aide d'une configuration simple par rapport au cas où les paramètres doivent être ajustés pour chaque grain de speckle. Les surfaces rugueuses sont pour la majorité des surfaces de pentes modérées, ce qui confère à ce résultat une grande importance pratique.

Notre travail ouvre également la porte vers plusieurs voies de recherche qui méritent d'être développées ou approfondies.

La méthode différentielle étant plus efficace que les méthodes classiquement utilisées (RCWA) pour les applications à la métrologie de la microélec-

---

tronique dans le cas de structures de formes arbitraires, ces structures plus complexes méritent d'être étudiées de façon plus approfondie, aussi bien pour des structures invariantes selon une dimension que pour des structures tridimensionnelles bipériodiques.

La diffusion par des structures périodiques avec des défauts (rugosité en particulier) est un domaine qui présente un intérêt pratique et théorique considérable et qui a été peu étudié jusqu'à présent. Nos simulations doivent être complétées par des modélisations utilisant le code tridimensionnel, ce qui peut être envisagée à assez brève échéance. Ensuite, il faudrait envisager d'élaborer une modélisation adaptée, qui tienne compte de façon rigoureuse de la partie périodique de la structure et de façon approximative de la partie non périodique. Un tel code permettrait de faire face à la complexité numérique du problème et pourrait trouver des applications, entre autres, à l'étude des réseaux rugueux mais aussi à celle des défauts dans les cristaux photoniques.

L'imagerie en milieu diffusant est une des thématiques fortes de notre équipe. Nous avons montré l'apport d'une modélisation rigoureuse à cette technique, nos résultats doivent maintenant être confirmés expérimentalement ou du moins relié de façon quantitative à des résultats déjà obtenus. La méthode différentielle devrait permettre de poursuivre l'étude des conditions d'annulation dans le cas des structures fortement diffusantes, domaine difficile, mais présentant des applications pratiques considérables.



# **Annexes**





## Annexe A

### Relations de récursion pour l'algorithme des matrices S

Nous cherchons à écrire les éléments de la matrice  $S^{(q+1)}$  en fonction de ceux des matrices  $S^{(q)}$  et  $T^{(q+1)}$ . Ces matrices lient les composantes propagatives et rétrogrades des champs aux interfaces 0,  $q$  et  $(q+1)$  de la façon suivante :

$$\begin{bmatrix} F_{q+1}^+ \\ F_0^- \end{bmatrix} = S^{(q+1)} \begin{bmatrix} F_0^+ \\ F_{q+1}^- \end{bmatrix} \text{ avec, } S^{(q+1)} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(q+1)} & S_{12}^{(q+1)} \\ S_{21}^{(q+1)} & S_{22}^{(q+1)} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{bmatrix} F_q^+ \\ F_0^- \end{bmatrix} = S^{(q)} \begin{bmatrix} F_0^+ \\ F_q^- \end{bmatrix} \text{ avec, } S^{(q)} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(q)} & S_{12}^{(q)} \\ S_{21}^{(q)} & S_{22}^{(q)} \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

et

$$\begin{bmatrix} F_{q+1}^- \\ F_{q+1}^+ \end{bmatrix} = T^{(q+1)} \begin{bmatrix} F_q^- \\ F_q^+ \end{bmatrix} \text{ avec, } T^{(q+1)} = \begin{bmatrix} T_{11}^{(q+1)} & T_{12}^{(q+1)} \\ T_{21}^{(q+1)} & T_{22}^{(q+1)} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

En développant ces 3 équations matricielles on obtient 6 équations faisant intervenir les blocs des matrices S et T :

$$\begin{cases} F_{q+1}^+ = S_{11}^{(q+1)} F_0^+ + S_{12}^{(q+1)} F_{q+1}^- \\ F_0^- = S_{21}^{(q+1)} F_0^+ + S_{22}^{(q+1)} F_{q+1}^- \end{cases} \quad (\text{A.4a})$$

$$\quad \quad \quad (\text{A.4b})$$

$$\begin{cases} F_q^+ = S_{11}^{(q)} F_0^+ + S_{12}^{(q)} F_q^- \\ F_0^- = S_{21}^{(q)} F_0^+ + S_{22}^{(q)} F_q^- \end{cases} \quad (\text{A.5a})$$

$$\quad \quad \quad (\text{A.5b})$$

et

$$\begin{cases} F_{q+1}^- = T_{11}^{(q+1)} F_q^- + T_{12}^{(q+1)} F_q^+ \\ F_{q+1}^+ = T_{21}^{(q+1)} F_q^- + T_{22}^{(q+1)} F_q^+ \end{cases} \quad (\text{A.6a})$$

$$\quad \quad \quad (\text{A.6b})$$

L'équation (A.5b) donne l'expression de  $F_q^-$ ,

$$F_q^- = [S_{22}^{(q)}]^{-1}[F_0^- - S_{21}^{(q)}F_0^+], \quad (\text{A.7})$$

qu'on introduit dans (A.6a) pour obtenir,

$$F_{q+1}^- = T_{11}^{(q+1)}[S_{22}^{(q)}]^{-1}[F_0^- - S_{21}^{(q)}F_0^+] + T_{12}^{(q+1)}F_q^+. \quad (\text{A.8})$$

On remplace  $F_q^+$  par son expression donnée par (A.5a),

$$F_{q+1}^- = T_{11}^{(q+1)}[S_{22}^{(q)}]^{-1}[F_0^- - S_{21}^{(q)}F_0^+] + T_{12}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}F_0^+ + T_{12}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}F_q^-, \quad (\text{A.9})$$

puis  $F_q^-$  par son expression donnée par (A.7),

$$\begin{aligned} F_{q+1}^- &= T_{11}^{(q+1)}[S_{22}^{(q)}]^{-1}[F_0^- - S_{21}^{(q)}F_0^+] + T_{12}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}F_0^+ \\ &\quad + T_{12}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}[S_{22}^{(q)}]^{-1}[F_0^- - S_{21}^{(q)}F_0^+] \\ &= [T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}][S_{22}^{(q)}]^{-1}F_0^- \\ &\quad + [T_{12}^{(q+1)}S_{11}^{(q)} - [T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}][S_{22}^{(q)}]^{-1}S_{21}^{(q)}]F_0^+. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

En posant  $Z = [T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}]^{-1}$ , on a,

$$ZF_{q+1}^- = [S_{22}^{(q)}]^{-1}F_0^- + [ZT_{12}^{(q+1)}S_{11}^{(q)} - [S_{22}^{(q)}]^{-1}S_{21}^{(q)}]F_0^+, \quad (\text{A.11})$$

soit,

$$F_0^- = [S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q)}ZT_{12}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}]F_0^+ + S_{22}^{(q)}ZF_{q+1}^-, \quad (\text{A.12})$$

d'où on pourra déduire les expressions de  $S_{21}^{(q+1)}$  et  $S_{22}^{(q+1)}$ .

D'autre part, dans l'équation (A.7), on remplace  $F_0^-$  par son expression donnée par (A.4b)

$$\begin{aligned} F_q^- &= [S_{22}^{(q)}]^{-1}[S_{21}^{(q+1)}F_0^+ + S_{22}^{(q+1)}F_{q+1}^- - S_{21}^{(q)}F_0^+] \\ &= [S_{22}^{(q)}]^{-1}[(S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)})F_0^+ + S_{22}^{(q+1)}F_{q+1}^-]. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Dans l'équation (A.6b) on remplace  $F_q^+$  par son expression donnée par (A.5a),

$$\begin{aligned} F_{q+1}^+ &= T_{21}^{(q+1)}F_q^- + T_{22}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}F_0^+ + T_{22}^{(q+1)}S_{12}^{(q)}F_q^- \\ &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)}S_{12}^{(q)})F_q^- + T_{22}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}F_0^+ \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

puis  $F_q^-$  par son expression donnée par (A.13),

$$\begin{aligned} F_{q+1}^+ &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)}S_{12}^{(q)})[S_{22}^{(q)}]^{-1}[(S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)})F_0^+ + S_{22}^{(q+1)}F_{q+1}^-] \\ &\quad + T_{22}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}F_0^+ \\ &= [(T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)}S_{12}^{(q)})[S_{22}^{(q)}]^{-1}(S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)}) + T_{22}^{(q+1)}S_{11}^{(q)}]F_0^+ \\ &\quad + (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)}S_{12}^{(q)})[S_{22}^{(q)}]^{-1}S_{22}^{(q+1)}F_{q+1}^-, \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

d'où on déduira les expressions de  $S_{11}^{(q+1)}$  et  $S_{12}^{(q+1)}$ .

En identifiant l'équation (A.11) à l'équation (A.4) on déduit,

$$S_{22}^{(q+1)} = S_{22}^{(q)} Z \quad (\text{A.16})$$

$$S_{21}^{(q+1)} = S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q)} Z T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)}, \quad (\text{A.17})$$

soit,

$$S_{22}^{(q+1)} = S_{22}^{(q)} Z \quad (\text{A.18})$$

$$S_{21}^{(q+1)} = S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)}. \quad (\text{A.19})$$

De même, par identification entre les équations (A.14) et (A.4a), on déduit,

$$\begin{aligned} S_{11}^{(q+1)} &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) [S_{22}^{(q)}]^{-1} (S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)}) + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \\ S_{12}^{(q+1)} &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) [S_{22}^{(q)}]^{-1} S_{22}^{(q+1)}, \end{aligned}$$

soit,

$$S_{11}^{(q+1)} = (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) [S_{22}^{(q)}]^{-1} (S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)}) + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \quad (\text{A.20})$$

$$S_{12}^{(q+1)} = (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) Z. \quad (\text{A.21})$$

D'après l'équation (A.17), on a

$$S_{21}^{(q+1)} - S_{21}^{(q)} = -S_{22}^{(q)} Z T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)},$$

d'où,

$$S_{11}^{(q+1)} = -(T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) Z T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)}. \quad (\text{A.22})$$

Et en utilisant l'équation (A.21) on obtient,

$$\begin{aligned} S_{11}^{(q+1)} &= -S_{12}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} + T_{22}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \\ &= (T_{22}^{(q+1)} - S_{12}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)}) S_{11}^{(q)}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

En résumé, les relations de récursion sont

$$\begin{aligned} S_{22}^{(q+1)} &= S_{22}^{(q)} Z(q) \\ S_{12}^{(q+1)} &= (T_{21}^{(q+1)} + T_{22}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}) Z(q) \\ S_{21}^{(q+1)} &= S_{21}^{(q)} - S_{22}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)} S_{11}^{(q)} \\ S_{11}^{(q+1)} &= (T_{22}^{(q+1)} - S_{12}^{(q+1)} T_{12}^{(q+1)}) S_{11}^{(q)}, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

avec,

$$Z(q) = [T_{11}^{(q+1)} + T_{12}^{(q+1)} S_{12}^{(q)}]^{-1} \quad (\text{A.25})$$



## **Annexe B**

### **Comparaison entre la méthode différentielle et la méthode des sources fictives pour un réseau diélectrique en transmission**

TE			
Ordre	$e_{MFS}$	$e_{DM}$	$e_{MFS} - e_{DM}$
-8	0,000000010	0,000000010	0,0000000004
-7	0,000000027	0,000000027	0,0000000003
-6	0,000000003	0,000000003	0,0000000001
-5	0,000000069	0,000000069	0,0000000001
-4	0,000015253	0,000015240	0,0000000129
-3	0,001013579	0,001013501	0,0000000780
-2	0,022738040	0,022738876	0,0000008360
-1	0,186525900	0,186525791	0,0000001090
0	0,334155900	0,334153259	0,0000026410
+1	0,336657400	0,336658394	0,0000009940
+2	0,016406660	0,016407201	0,0000005410
+3	0,004548988	0,004549572	0,0000005840
+4	0,001338025	0,001338132	0,0000001070
TM			
Ordre	$e_{MFS}$	$e_{DM}$	$e_{MFS} - e_{DM}$
-8	0,000000009	0,000000009	0,0000000001
-7	0,000000035	0,000000032	0,0000000035
-6	0,000000008	0,000000007	0,0000000005
-5	0,000000100	0,000000097	0,0000000034
-4	0,000022153	0,000022144	0,0000000089
-3	0,001271903	0,001271741	0,0000001620
-2	0,026662120	0,026661619	0,0000005010
-1	0,215613500	0,215598073	0,0000154270
0	0,412591800	0,412516658	0,0000751420
+1	0,278608600	0,278727999	0,0001193990
+2	0,018176070	0,018145503	0,0000305670
+3	0,000478413	0,000479686	0,0000012734
+4	0,000214227	0,000215810	0,0000015828

**Tableau B.1** Même calculs que pour le tableau 2.3, pour les efficacités en transmission. En TM, ce sont les résultats obtenus avec la formulation (1.44) (sans les règles de factorisation) qui sont présentés.

## Annexe C

### Relations entre les composantes des champs selon (Ox) et celles selon (Oy)

Dans le cas d'une onde plane en milieu linéaire, homogène et isotrope on a entre les champs  $E$  et  $H'$  la relation

$$H' = k \wedge E, \quad (C.1)$$

qui peut s'écrire également

$$k^2 E = -k \wedge H'. \quad (C.2)$$

La relation (C.1) donne

$$\begin{cases} H'_x = \sigma_y E_z - \beta E_y \\ H'_y = \beta E_x - \sigma_x E_z \\ H'_z = \sigma_x E_y - \sigma_y E_x \end{cases} \quad \begin{matrix} (C.3a) \\ (C.3b) \\ (C.3c) \end{matrix}$$

et (C.2),

$$\begin{cases} k^2 E_x = -\sigma_y H'_z + \beta H'_y \\ k^2 E_y = -\beta H'_x + \sigma_x H'_z \\ k^2 E_z = -\sigma_x H'_y + \sigma_y H'_x. \end{cases} \quad \begin{matrix} (C.4a) \\ (C.4b) \\ (C.4c) \end{matrix}$$

En combinant (C.3c) et (C.4a) de façon à éliminer  $H'_z$  et (C.3a) et (C.4c) de façon à éliminer  $E_z$ , on obtient

$$\begin{cases} E_x = \frac{1}{k^2 - \sigma_y^2} (-\sigma_y \sigma_x E_y + \beta H'_y) \\ H'_x = \frac{1}{k^2 - \sigma_y^2} (-\beta k^2 E_y - \sigma_y \sigma_x H'_y). \end{cases} \quad \begin{matrix} (C.5a) \\ (C.5b) \end{matrix}$$



On prendra garde au fait que la valeur de  $k$  dépend du milieu où l'on se trouve et que le signe de  $\beta$  dépend du sens de propagation de l'onde selon  $(Oz)$ . En pratique on écrira  $-|\beta|$  au lieu de  $\beta$  dans le cas d'une onde rétrograde.

## Annexe D

### Passage des vecteurs $F$ aux vecteurs $V$ et réciproquement

On définit le vecteur  $[F]$  par

$$[F] = \begin{bmatrix} [E_x] \\ [E_y] \\ [H'_x] \\ [H'_y] \end{bmatrix}. \quad (D.1)$$

Le vecteur  $[F]$  est constitué des composantes des champs  $E$  et  $H'$  et est utilisé lors de l'intégration du système d'équations différentielles issu des équations de Maxwell décrivant la structure.

Le vecteur  $[V]$  est constitué des composantes \*\*\*? \*\*\* et rétrogrades des projections sur  $(Oy)$  des champs  $E$  et  $H'$ ,

$$[V] = \begin{bmatrix} \vdots \\ A_n^- \exp(-i\beta_n z) \\ \vdots \\ B_n^- \exp(-i\beta_n z) \\ \vdots \\ A_n^+ \exp(i\beta_n z) \\ \vdots \\ B_n^+ \exp(i\beta_n z) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [V_E^-] \\ [V_H^-] \\ [V_E^+] \\ [V_H^+] \end{bmatrix}. \quad (D.2)$$

les vecteurs  $[V]$  sont utilisés pour la constitution des matrices  $T$  et il est nécessaire de pouvoir passer d'une des écriture à l'autre.

## 1 Passage du vecteur $[V]$ au vecteur $[F]$ équivalent

Par définition,  $[V_E^-]$  et  $[V_E^+]$  sont les composantes retrogrades et progressives du champ  $[E_y]$ ,

$$[E_y] = [V_E^-] + [V_E^+]. \quad (D.3)$$

De même,  $[V_H^-]$  et  $[V_H^+]$  sont les composantes retrogrades et progressives du champ  $[H_y]$ ,

$$[H'_y] = [V_H^-] + [V_H^+]. \quad (D.4)$$

A partir des relations (D.3), (D.4) et (C.5) on obtient  $[E_x]$ ,

$$[E_x] = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (-\sigma_{y,0}\sigma[V_E^-] - \beta[V_H^-] - \sigma_{y,0}\sigma[V_E^+] + \beta[V_H^+]) \quad (D.5)$$

et  $[H'_x]$ ,

$$[H'_x] = \frac{1}{k^2 - \sigma_{y,0}^2} (\beta k^2[V_E^-] - \sigma_{y,0}\sigma[V_H^-] - \beta k^2[V_E^+] - \sigma_{y,0}\sigma[V_H^+]). \quad (D.6)$$

Ces quatre relations (D.3), (D.4), (D.5) et (D.6) s'écrivent sous forme condensée

$$[F] = \Psi[V],$$

avec  $\Psi$ , la matrice définie par

$$\Psi = \begin{pmatrix} P_1 & -P_2 & P_1 & P_2 \\ \text{Id} & 0 & \text{Id} & 0 \\ k^2 P_2 & P_1 & -k^2 P_2 & P_1 \\ 0 & \text{Id} & 0 & \text{Id} \end{pmatrix}. \quad (D.7)$$

$P_1$  et  $P_2$  sont des matrices diagonales dont les éléments valent

$$(P_1)_{n,m} = -\delta_{n,m} \frac{\sigma_{y,0}\sigma_n}{k^2 - \sigma_{y,0}^2}$$

et

$$(P_2)_{n,m} = \frac{\beta_n}{k^2 - \sigma_{y,0}^2}.$$

## 2 Passage du vecteur $[F]$ au vecteur $[V]$ équivalent

L'équation (D.3) donne

$$[V_E^-] = [E_y] - [V_E^+] \quad (D.8)$$

et

$$[V_E^+] = [E_y] - [V_E^-], \quad (\text{D.9})$$

l'équation (D.4) donne

$$[V_H^-] = [H'_y] - [V_H^+] \quad (\text{D.10})$$

et

$$[V_H^+] = [H'_y] - [V_H^-]. \quad (\text{D.11})$$

En combinant (D.5) avec (D.8) et (D.10), on obtient

$$(k^2 - \sigma_{y,0}^2)[E_x] = -\sigma_{y,0}\sigma[E_y] - \beta[H'_y] + 2\beta[V_H^+]. \quad (\text{D.12})$$

A partir de (D.6) avec (D.8) et (D.10), on obtient

$$(k^2 - \sigma_{y,0}^2)[H'_x] = \beta k^2[E_y] - 2\beta k^2[V_E^+] - \sigma_{y,0}\sigma[H'_y]. \quad (\text{D.13})$$

(D.5) avec (D.9) et (D.11), donnent

$$(k^2 - \sigma_{y,0}^2)[E_x] = -\sigma_{y,0}\sigma[E_y] - 2\beta[V_H^-] + \beta[H'_y]. \quad (\text{D.14})$$

Et (D.6) avec (D.9) et (D.11), donnent

$$(k^2 - \sigma_{y,0}^2)[H'_x] = 2\beta k^2[V_E^-] - \beta k^2[E_y] - k_y\sigma[H'_y]. \quad (\text{D.15})$$

En résumé,

$$[V_E^-] = \frac{1}{2} \left( [E_y] + \frac{k^2 - \sigma_{y,0}^2}{\beta k^2} [H'_x] + \frac{\sigma_{y,0}}{\beta k^2} \sigma[H'_y] \right) \quad (\text{D.16})$$

$$[V_H^-] = \frac{1}{2} \left( -\frac{k^2 - \sigma_{y,0}^2}{\beta} [E_x] - \frac{\sigma_{y,0}}{\beta} \sigma[E_y] + [H'_y] \right) \quad (\text{D.17})$$

$$[V_E^+] = \frac{1}{2} \left( [E_y] - \frac{k^2 - \sigma_{y,0}^2}{\beta k^2} [H'_x] - \frac{\sigma_{y,0}}{\beta k^2} \sigma[H'_y] \right) \quad (\text{D.18})$$

$$[V_H^+] = \frac{1}{2} \left( \frac{k^2 - \sigma_{y,0}^2}{\beta} [E_x] + \frac{\sigma_{y,0}}{\beta} \sigma[E_y] + [H'_y] \right). \quad (\text{D.19})$$

Sous forme condensée, on a

$$[V] = \Psi^{-1}[F].$$

La matrice  $\Psi^{-1}$  est donnée par

$$\Psi^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \text{Id} & P_4/k^2 & P_3/k^2 \\ -P_4 & -P_3 & 0 & \text{Id} \\ 0 & \text{Id} & -P_4/k^2 & -P_3/k^2 \\ P_4 & P_3 & 0 & \text{Id} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.20})$$

les matrices  $P_3$  et  $P_4$  ayant leurs éléments définis par

$$\begin{aligned}(P_3)_{n,m} &= \delta_{n,m} \frac{\sigma_{y,0}}{\beta_n} \sigma_n \\ (P_4)_{n,m} &= \delta_{n,m} \frac{k^2 - \sigma_{y,0}^2}{\beta_n}.\end{aligned}$$

# Bibliographie

- [1] M.G. Moharam and T.K. Gaylord. Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction. *Journal of the Optical Society of America A*, 71(7) :811–818, 1981.
- [2] E. Popov, M. Nevière, B. Gralak, and G. Tayeb. Staircase approximation validity for arbitrary-shaped gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 19(1) :33–42, 2002.
- [3] L. Li. Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(9) :1870–1876, 1996.
- [4] E. Popov and M. Nevière. Grating theory : new equations in Fourier space leading to fast converging results for TM polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, 17(10) :1773–1784, 2000.
- [5] L. Li. New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 14(10) :2758–2767, 1997.
- [6] E. Popov and M. Nevière. Maxwell equations in Fourier space : fast-converging formulation for diffraction by arbitrary shaped, periodic, anisotropic media. *Journal of the Optical Society of America A*, 18(11) :2886–2894, 2001.
- [7] A. Yamaguchi, K. Ichinose, S. Shimamoto, H. Fukuda, R. Tsuchiya, K. Ohnishi, H. Kawada, and T. Iizumi. Metrology of LER : influence of line-edge roughness (LER) on transistor performance. *Proceedings of SPIE*, 5375 :468, 2004.
- [8] K. Patterson, J.L. Sturtevant, J.R. Alvis, N. Benavides, D. Bonser, N. Cave, C. Nelson-Thomas, W.D. Taylor, and K.L. Turnquest. Experimental determination of the impact of polysilicon LER on sub-100-nm transistor performance. *Proceedings of SPIE*, 4344 :809, 2001.
- [9] C. Deumié, H. Giovannini, and C. Amra. Ellipsometry of light scattering from multilayer coatings. *Applied Optics*, 35(28) :5600, 1996.

- [10] L. Arnaud, G. Georges, C. Deumié, and C. Amra. Discrimination of surface and bulk scattering of arbitrary level based on angle-resolved ellipsometry : Theoretical analysis. *Optics Communications*, 281(6) :1739–1744, 2008.
- [11] S. Chanfreau, G. Georges, R. Ghidossi, L. Arnaud, Y. Wyart, C. Deumié, and P. Moulin. Caractérisation de membranes poreuses par techniques optiques. In *Méthode et techniques optiques pour l'industrie*, Mulhouse, 2006.
- [12] C. Amra, C. Deumie, and O. Gilbert. Elimination of polarized light scattered by surface roughness or bulk heterogeneity. *Optics Express*, 13(26) :10854–10864, 2005.
- [13] R. Petit. Diffraction d'une onde plane par un reseau metallique. *Rev. Opt.*, 45 :353–370, 1966.
- [14] G. Cerutti-Maori, R. Petit, and M. Cadilhac. Etude numérique du champ diffracté par un réseau. *CR Acad. Sci*, 268 :1060–1063, 1969.
- [15] H. Giovannini and C. Amra. Scattering-reduction effect with overcoated rough surfaces : theory and experiment. *Applied Optics*, 36 :5574–5579, 1997.
- [16] H. Giovannini, M. Saillard, and A. Sentenac. Numerical study of scattering from rough inhomogeneous films. *Journal of the Optical Society of America A*, 15(5) :1182–1191, 1998.
- [17] R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M. Sands. *Le cours de physique de Feynman*. InterEditions, 1992.
- [18] C. Baudier. *Diffraction d'ondes électromagnétiques par des surfaces rugueuses aléatoires : méthode approchée de Rayleigh et méthode exacte en coordonnées non-orthogonales*. PhD thesis, Université de Versailles, 2002.
- [19] J.L.M.Q. González and D. Thompson. Getting started with Numerov's method. *Computers in Physics*, 11 :514, 1997.
- [20] B. Gough. *GNU Scientific Library Reference Manual*. Network Theory Ltd., 2nd edition, 2006.
- [21] A.C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. *North-Holland, Amsterdam*, 1 :55–64, 1983.
- [22] W.H Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery. *Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, third edition, 2007.
- [23] R. Petit. *Ondes électromagnétiques en radioélectricité et en optique*. Masson, 1993.

- 
- [24] R. Petit, M. Cadilhac, D. Maystre, P. Vincent, M. Nevière, R.C. McPhedran, G.H. Derrick, and L.C. Botten. *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag, 1980.
  - [25] M. Nevière and E. Popov. *Light Propagation in Periodic Media : Differential Theory and Design*. Marcel Dekker, 2003.
  - [26] L. Li. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(5) :1024–1037, 1996.
  - [27] P. Lalanne and G.M. Morris. Highly improved convergence of the coupled-wave method for TM polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(4) :779–784, 1996.
  - [28] G. Granet and B. Guizal. Efficient implementation of the coupled-wave method for metallic lamellar gratings in TM polarization. *Journal of the Optical Society of America A*, 13(5) :1019–1023, 1996.
  - [29] G. Tayeb. *Contribution à l'étude de la diffraction des ondes électromagnétiques par des réseaux. Réflexions sur les méthodes existantes et sur leur extension aux milieux anisotropes*. PhD thesis, Université Aix-Marseille III, 1990.
  - [30] R. Petit. Contribution à l'étude de la diffraction par un réseau métallique. *Rev. Opt.*, 45 :249–276, 1966.
  - [31] D. Maystre. Sur la diffraction d'une onde plane par un reseau metallique de conductivite finie. *Optics Communications*, 6(1) :50–54, 1972.
  - [32] G. Tayeb. The method of fictitious sources applied to diffraction gratings. *Special issue on Generalized Multipole Techniques (GMT) of Applied Computational Electromagnetics Society Journal*, 9 :90–100, 1994.
  - [33] S.T. Peng, T. Tamir, and H.L. Bertoni. Theory of periodic dielectric waveguides. *IEEE Trans. Microwave Theory Tech*, 23(1) :123–133, 1975.
  - [34] L. Li. Multilayer modal method for diffraction gratings of arbitrary profile, depth, and permittivity. *Journal of the Optical Society of America A*, 10(12) :2581–2591, 1993.
  - [35] M.G. Moharam, D.A. Pommet, E.B. Grann, and TK Gaylord. Stable implementation of the rigorous coupled-wave analysis for surface-relief gratings : enhanced transmittance matrix approach. *Journal of the Optical Society of America A*, 12(5) :1077–1086, 1995.
  - [36] M.G. Moharam, E.B. Grann, D.A. Pommet, and T.K. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 12(5) :1068–1076, 1995.



- [37] T. Novikova, A. De Martino, R. Ossikovski, and B. Dré villon. Metrological applications of Mueller polarimetry in conical diffraction for overlay characterization in microelectronics. *Eur. Phys. J. Appl. Phys*, 31 :63–69, 2005.
- [38] D. Maystre and M. Neviere. Electromagnetic theory of crossed gratings. *Journal of Optics*, 9(5) :301–306, 1978.
- [39] P. Vincent. A finite-difference method for dielectric and conducting crossed gratings. *Optics Communications*, 26(3) :293–296, 1978.
- [40] R. Bräuer and O. Bryngdahl. Electromagnetic diffraction analysis of two-dimensional gratings. *Optics Communications*, 100(1-4) :1–5, 1993.
- [41] E. Noponen and J. Turunen. Eigenmode method for electromagnetic synthesis of diffractive elements with three-dimensional profiles. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(9) :2494–2502, 1994.
- [42] E. Popov, M. Nevière, S. Enoch, and R. Reinisch. Theory of light transmission through subwavelength periodic hole arrays. *Physical Review B*, 62(23) :16100–16108, 2000.
- [43] N. Bonod, S. Enoch, L. Li, E. Popov, and M. Neviere. Resonant optical transmission through thin metallic films with and without holes. *Optics Express*, 11(5) :482–490, 2003.
- [44] C. Rockstuhl, T. Zentgraf, E. Pshenay-Severin, J. Petschulat, A. Chipouline, J. Kuhl, T. Pertsch, H. Giessen, and F. Lederer. The origin of magnetic polarizability in metamaterials at optical frequencies-an electrodynamic approach. *Optics Express*, 15(14) :8871–8883, 2007.
- [45] R. Quintanilha, J. Hazart, P. Thony, and D. Henry. Application of spectroscopic scatterometry method in hole matrices analysis. *Proceedings of SPIE*, 5752 :204, 2005.
- [46] T. Schuster, J. Ruoff, N. Kerwien, S. Rafler, and W. Osten. Normal vector method for convergence improvement using the RCWA for crossed gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 24(9) :2880–2890, 2007.
- [47] L.S. Blackford et al. An Updated Set of Basic Linear Algebra Subprograms :(BLAS). *ACM Transactions on Mathematical Software*, 28(2) :135–151, 2002.
- [48] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, third edition, 1999.

- 
- [49] M. Frigo and SG Johnson. The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2) :216–231, 2005.
  - [50] G.H. Derrick, R.C. McPhedran, D. Maystre, and M. Nevière. Crossed gratings : A theory and its applications. *Applied Physics A : Materials Science & Processing*, 18(1) :39–52, 1979.
  - [51] J.J. Greffet, C. Baylard, and P. Versaevel. Diffraction of electromagnetic waves by crossed gratings : a series solution. *Opt. Lett*, 17 :1740–1742, 1992.
  - [52] G. Granet. Analysis of diffraction by surface-relief crossed gratings with use of the Chandezon method : application to multilayer crossed gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 15(5) :1121–1131, 1998.
  - [53] O.P. Bruno and F. Reitich. Numerical solution of diffraction problems : a method of variation of boundaries. III. Doubly periodic gratings. *Journal of the Optical Society of America A*, 10(12) :2551–2562, 1993.
  - [54] M. Totzeck. Numerical simulation of high-NA quantitative polarization microscopy and corresponding near-fields. *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, 112(9) :399–406, 2001.
  - [55] C. Amra, C. Grèzes-Besset, and L. Bruel. Comparison of surface and bulk scattering in optical multilayers. *Appl. Opt*, 32 :5492–5503, 1993.
  - [56] A. Sentenac, H. Giovannini, and M. Saillard. Scattering from rough inhomogeneous media : splitting of surface and volume scattering. *Journal of the Optical Society of America A*, 19(4) :727–736, 2002.
  - [57] C. Amra, D. Torricini, and P. Roche. Multiwavelength (0.45-10.6,  $\mu\text{m}$ ) angle-resolved scatterometer or how to extend the optical window. *APPLIED OPTICS*, 32(28/1), 1993.
  - [58] C. AMRA, J. APFEL, and E. PELLETIER. Role of interface correlation in light scattering by a multilayer. *Applied Optics*, 31(16) :3134–3151, 1992.
  - [59] C. Amra, G. Albrand, and P. Roche. Theory and application of antiscattering single layers : antiscattering antireflection coatings. *Applied Optics*, 25(16) :2695–2702, 1986.
  - [60] S. Maure, G. Albrand, and C. Amra. Low-level scattering and localized defects. *Applied Optics*, 35 :5573–5582, 1996.
  - [61] C. Deumié. *Ellipsométrie sur champ diffus et analyse multi-échelle de la microstructure des multicouches optiques : Diffusion Lumineuse, Microscopie à Force Atomique, Microscopie à Effet Tunnel Optique*. PhD thesis, Université de droit, d'économie et des sciences d'Aix-Marseille, 1997.

- [62] O. Gilbert, C. Deumié, and C. Amra. Angle-resolved ellipsometry of scattering patterns from arbitrary surfaces and bulks. *Optics Express*, 13(7) :2403–2418, 2005.
- [63] O. Gilbert. *Ellipsométrie sur champ spéculaire et diffus : théorie et expérience*. PhD thesis, Université Paul Cézanne, Aix-Marseille III, 2004.
- [64] G. Georges. *Ellipsométrie de speckle sur champ diffus : annulation sélective de sources pour l'imagerie en milieu diffusant*. PhD thesis, Université Paul Cézanne, Aix-Marseille III, 2007.
- [65] C. Amra. Light scattering from multilayer optics. I. Tools of investigation. *Journal of the Optical Society of America A*, 11(1) :197–210, 1994.
- [66] C. Deumié, O. Gilbert, G. Georges, L. Arnaud, and C. Amra. Ellipsometry of reflected and scattered fields for the analysis of substrate optical quality. *Applied Optics*, 45(7) :1640–1649, 2006.
- [67] C. Amra. First-order vector theory of bulk scattering in optical multilayers. *Journal of the Optical Society of America A*, 10(2) :365–374, 1993.
- [68] C. Amra and C. Deumie. Z-probing of optical multilayers : theory. *Optics Letters*, 31(18) :2704–2706, 2006.
- [69] C. Amra, C. Deumié, G. Georges, C. Grèzes-Besset, and F. Chazallet. Efficiency of polarimetric z probing in optical multilayers. *Applied Optics*, 47(13) :279–283, 2008.
- [70] G. Georges, C. Deumié, and C. Amra. Selective probing and imaging in random media based on the elimination of polarized scattering. *Optics Express*, 15(15) :9804–9816, 2007.
- [71] G. Georges, L. Arnaud, L. Siozade, N. Le Neindre, F. Chazallet, M. Zer-rad, C. Deumié, and C. Amra. From angle-resolved ellipsometry of light scattering to imaging in random media. *Applied Optics*, 47(13) :257–265, 2008.
- [72] H. Giovannini, C. Deumie, H. Akhouayri, and C. Amra. Angle-resolved polarimetric phase measurement for the characterization of gratings. *Optics Letters*, 21(20) :1619–1621, 1996.
- [73] C. Amra. From light scattering to the microstructure of thin-film multilayers. *Applied Optics*, 32(28) :5481–5491, 1993.
- [74] K. Belkebir and A. Sentenac. High-resolution optical diffraction microscopy. *Journal of the Optical Society of America A*, 20(7) :1223–1229, 2003.
- [75] K. Belkebir, S. Bonnard, F. Pezin, P. Sabouroux, and M. Saillard. Validation of 2 D inverse scattering algorithms from multi-frequency experimental data. *Journal of electromagnetic waves and applications*, 14(12) :1637–1667, 2000.

- 
- [76] G.E. Moore. Cramming more components on to integrated circuits. *Electronics Journal*, 38(8) :114–117, 1965.
  - [77] International Technology Roadmap for Semiconductors. Technical report, ITRS, 2007.
  - [78] K. Levenberg. A method for the solution of certain nonlinear problems in least squares. *Q. Appl. Math*, 2 :164–168, 1944.
  - [79] R. Fletcher. *Practical methods of optimization*. Wiley-Interscience New York, NY, USA, 1987.
  - [80] O. Sorkhabi, H. Pois, H. Chu, Y. Wen, J. Opsal, and W.D. Kim. Performance of measuring contact holes using the Opti-Probe 7341 3-D RT/CD technology. *Proc. SPIE*, 5752 :912–921, 2005.
  - [81] J. Huang, K. Barry, C.M. Ke, B. Lin, and A. Li. Application of 3D scatterometry to contacts and vias at 90nm and beyond. *Proceedings of SPIE*, 5752 :1266, 2005.
  - [82] Z. Jiang, O. Sorkhabi, H. Chu, X.L. Cao, G. Li, Y. Wen, J.L. Opsal, and Y.C. Chang. Contact hole application for lithography process development using the Opti-Probe three-dimensional RT/CD technology. *Proceedings of SPIE*, 5375 :1364, 2004.
  - [83] R. Quintanilha, J. Hazart, P. Thony, and D. Henry. Application of spectroscopic scatterometry method in hole matrices analysis. *Proceedings of SPIE*, 5752 :204, 2005.
  - [84] L. Poladian, F. Ladouceur, and PD Miller. Effects of surface roughness on gratings. *Journal of the Optical Society of America B*, 14(6) :1339–1344, 1997.
  - [85] M. Saillard, E. Popov, L. Tsonev, L. Scandella, and N. Kruse. Light diffraction from rough gratings. *Applied Optics*, 34 :4883–4891, 1995.





## Résumé

La diffraction et la diffusion de la lumière sont étudiées de façon théorique et expérimentale puis utilisées pour les applications à la métrologie des composants sub-microniques dans l'industrie de la microélectronique, ainsi qu'aux applications dans le domaine de l'imagerie sélective en milieu diffusant basée sur les propriétés ellipsométriques de la lumière.

La modélisation est réalisée à l'aide de la méthode différentielle que nous avons implémentée pour plusieurs situations : diffraction 2D classique et conique et diffraction 3D. Outre les améliorations déjà connues, algorithme des matrices  $S$  et règles de factorisation, nous proposons une nouvelle méthode d'intégration matricielle des équations du champ, plus rapide que les formulations existantes, qui nous permet d'aborder le cas des structures 3D de forme arbitraire, aléatoires ou périodiques.

Cet outil est ensuite appliqué à l'extension de l'imagerie sélective au cas des surfaces très rugueuses et au problème inverse en microélectronique.

**Mots-clefs :** Diffraction, diffusion de la lumière, méthode différentielle, problème inverse, scatterométrie, ellipsométrie, imagerie en milieu diffusant.

## Abstract

We study diffraction and light scattering, both theoretically and experimentally. We use the differential method that we have implemented for 2D structures in classical and conical incidence and for biperiodic 3D structures.

Beyond the classical improvement of the  $S$ -matrix algorithm and the Fourier series factorisation rules, we propose a new matricial integration algorithm for the equations of the field. This new and faster method allows us to address the case of diffraction by 3D objects of arbitrary shape, while respecting the factorisation rules.

We then use this tool to study the inverse problem applied to the metrology of microelectronics components with submicrometric dimensions, we show that the differential method is superior to the traditionally used RCWA in the case of components with non-lamellar shapes. We also apply this tool to the study of the extension of the selective imaging method in random media to the case of surfaces with strong roughness and moderated slopes.

**Key-words :** Diffraction, light scattering, differential method, inverse problem, scatterometry, ellipsometry, imaging in random media.